MUSTERBILDUNG IN EINEM REAKTIONS-TRANSPORT-SYSTEM UND DEREN GRUPPENTHEORETISCHE ANALYSE

DISSERTATION
zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften

der Fakultät für Chemie und Pharmazie
der Eberhard - Karls - Universität zu Tübingen

vorgelegt von
HARTMUT FROMM
aus Zeven

1984

MUSTERBILDUNG IN EINEM REAKTIONS-TRANSPORT-SYSTEM UND DEREN GRUPPENTHEORETISCHE ANALYSE

DISSERTATION
zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften

der Fakultät für Chemie und Pharmazie
der Eberhard - Karls - Universität zu Tübingen

vorgelegt von
HARTMUT FROMM
aus Zeven

1984

A b s t r a c t

FROMM, Hartmut:

MUSTERBILDUNG IN EINEM REAKTIONS-TRANSPORT-SYSTEM UND DEREN GRUPPENTHEORETISCHE ANALYSE

Computerrechnungen für ein Differentialgleichungssystem ergaben eine große Anzahl an verschiedenartigen Mustern. Das Differentialgleichungssystem stellt ein Reaktionssystem mit Substratinhibition in einem kompartementierten Medium dar. Ein solches Reaktionstransportsystem ist als wahrscheinlich chemisch realisierbares Funktionsmodell für vielleicht weitaus kompliziertere Systeme in lebenden Organismen von theoretischem Interesse.

Die gruppentheoretische Analyse, Klassifizierung und Charakterisierung der Muster ergab, daß alle gefundenen Muster auch theoretisch als Muster von Größensorten vorhersagbar sind, und daß diese Musterbildung dann durch die Transportkopplung der Kompartemente erzwungen wird, wenn in den Zellen irgendein beliebiger nichtlinearer Reaktionsmechanismus mit mindestens zwei Substanzen vorliegt, der mit den Elementen des Transportsystems verknüpf ist.

Diese Musterbildungen lassen Deutungen für embroynale Entwicklungsfelder zu, wie sie z.B. im Vegetationkegel von Samenpflanzen vorliegen. Es gibt Muster mit verschieden hoher Ordnung an Symmetrie.

Die Existenz und Stabilität der verschiedenen Mustertypen hängt davon ab, ob irgendein Parameter des Reaktionstransportsystems über oder unter einem Schwellenwert liegt. Die Schwellenwerte selbst sind Funktionen der übrigen Parameter. Solche die Existenz und/oder die Stabilität von bestimmten Mustertypen beeinflußende Parameter sind die Membrandurchlässigkeit, die Enzymaktivität und -konzentration, der Substanzzufluß, die räumliche Ausdehnung des Interaktionsfeldes u. ä. mehr.

Für die Prüfung der Güte eines numerischen Verfahrens, das viele Minima und Maxima finden kann, ist ein Differentialgleichungssystem besonders geeignet, für das Lösungen in einer größeren Anzahl algebraisch, speziell gruppentheoretisch erschließbar sind. Die gruppentheoretische Erschließung stellt eine Hüllenoperation dar.

Diese Arbeit entstand in den Jahren 1978 - 1984
am Lehrstuhl für theoretische Chemie der
Universität Tübingen.
Ich möchte Herrn Prof. Dr. Friedrich Franz Seelig
für die Anregungen danken, die ich in dieser Zeit
von ihm erhalten habe, und für die Geduld, die es
mir erlaubte, diese Arbeit zu einem befriedigenden
Abschluß zu bringen.

Ich möchte der Gerhard Rösch - Stiftung
für ein Stipendium im Jahr 1984 danken.

Tag der mündlichen Prüfung: 20. Juli 1 9 8 4

Dekan:	Prof. Dr. J. Strähle
1. Berichterstatter:	Prof. Dr. F. F. Seelig
2. Berichterstatter:	Prof. Dr. O. Rössler

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41536515_0005

Musterbildung in einem Reaktions-Transport-System
und deren gruppentheoretische Analyse.

		Seite
1.	Einleitung	1
2.	Vorbemerkungen	5
2.1.	Allgemeine algebraische Vorbemerkungen	5
2.2.	Konstruktion einer symmetrieangepaßten Basis	9
2.2.1.	Voraussetzung für die Zerlegung eines Operators auf einem strukturierten Vektorraum	9
2.2.2.	Zerlegung des Darstellungsraums und dadurch hervorgerufenen Zerlegung eines Operators	10
2.3.	Zerlegung der Trägermenge unter der Wirkung der Gruppe	11
2.4.	Charakterisierung und Klassifizierung von Lösungen mit Hilfe der Gruppe	13
3.	Das Gleichungssystem	15
3.1.	Das Reaktionssystem	15
3.2.	Das Transportsystem	20
3.2.1.	Eigenschaften eines Mediums	20
3.2.2.	Das Vier-Kompartement-System	21
3.2.3.	Allgemeine Symmetriebetrachtungen für das Reaktions-Transport-System	23
3.2.4.	Die Bestimmung der zulässigen Symmetrie-Operationen	24
3.2.5.	Folgerungen aus der Symmetrie für die Lösungsmenge	34
3.2.6.	Die Transformation zur Vereinfachung des Gleichungs-Systems	40
3.2.7.	Das Reaktions-Transport-System in symmetrieangepaßten Koordinaten	41

3.3.	Der stationäre Zustand	44
3.3.1.	Die Reduktion des Dimension des Variablenraums unter steady state - Bedingungen von acht auf vier	44
3.3.2.	Formale Zerlegung des Variablen-Vektors und Übergang zu einem formal drei-dimensionalen System	45
3.3.3.	Die Bedeutung des nicht-linearen Reaktionsterms für die steady state - Lösungen	47
3.4.	Die Lösungen des Gleichungssystems mit innerer Symmetrie	48
3.4.1.	Der voll-symmetrische Fall	48
3.4.2.	Die Fälle mit einfacher innerer Symmetrie	48
3.5.	Die Untersuchung des allgemeinen Falls	51
3.5.1.	Die Reduzierung des allgemeinen Falls auf ein drei-dimensionales Gleichungssystem	51
3.5.2.	Gruppentheoretische Überlegungen beim Umgang mit Nicht-Linearitäten	52
3.5.3.	Die Bestimmung der Vorzeichen-Matrizen für die Nicht-Linearitäten 2. und 3. Grades	53
3.5.4.	Transformation der Vorzeichen-Matrizen	55
3.5.5.	Die Gleichungen im transformierten Gleichungssystem	56
3.6.	Gruppentheoretische Betrachtung des drei-dimensionalen Gleichungssystems	59
3.7.	Den Mustern lassen sich Zahlentupel zuordnen	63
4.	Parameter-Raum-Untersuchungen	65
4.1.	Die Existenzgrenzen	65
4.1.1.	Allgemeine Existenzbedingungen	65
4.1.2.	Existenzuntersuchungen für steady states mit innerer Symmetrie	66

4.1.3. Existenzbedingungen für steady states ohne innere Symmetrie 76
4.2. Stabilitätsgrenzen 77
4.2.1. Allgemeine Stabilitätsbedingungen 77
4.2.2. Die Jacobi-Matrix des Reaktions-Transport-Systems 79
4.2.3. Stabilitätsgrenzen für den steady state mit voller innerer Symmetrie 81
4.2.4. Stabilitätsgrenzen für die steady states mit einfacher innerer Symmetrie 86
4.2.5. Exemplarische Gebiete im Parameterraum 87
5. Numerischer Zugang 97
5.1. Ein numerisches Verfahren zur Bestimmung vieler steady states 97
5.2. Die gefundenen steady states 101
5.2.1. Charakterisierung und Klassifizierung von vielen steady states 101
5.2.2. Stabile steady states ohne innere Symmetrie 108
5.2.2.1. Die Gebiete des Parameterraums mit stabilen steady states ohne innere Symmetrie 108
5.2.2.2. Beispiele für Gebiete mit stabilen steady states ohne innere Symmetrie 110
5.2.3. Grenzen der Gebiete, in denen weitere steady states ohne innere Symmetrie auftreten 113
5.2.4. Beispiel für die Erreichbarkeit eines stabilen steady state ohne innere Symmetrie 119
5.3. Möglichkeit eines inversen Zugangs 121

5.4. Zusammenfassende Betrachtung der Ergebnisse 124

5.4.1. Die Güte des numerischen Verfahrens 124

5.4.2. Schwellenwerte der Parameter 125

6. Ausblick: Gruppentheoretische Betrachtungen zur Blattstellungslehre der Botanik 126

7. Literaturverzeichnis 134

1. Einleitung

Häufig begegnen wir in der Natur symmetrischen Formen. Pflanzen haben symmetrische oder fast symmetrische Blätter und Blüten, Kristalle lassen sich in Symmetrieklassen einteilen. In der Elementarteilchenforschung wird nach neuen Teilchen gesucht, weil Lücken in der Wigner'schen Klassifizierung nach Symmetrien vorhanden sind.

Symmetrische Anordnungen lassen sich mathematisch mit Hilfe der Gruppentheorie (GT) beschreiben. Die GT befaßt sich u.a. mit den Operationen z.B. Spiegelungen oder Drehungen, die eine Form auf sich selbst abbilden. Die Menge all dieser Operationen wird als Symmetriegruppe oder auch als Bauplan der Form bezeichnet. Dadurch ist mathematisch gesehen die Zahl möglicher Baupläne mit Symmetrie begrenzt und die GT kann eine vollständige Ausschöpfung aller möglicher Baupläne mit irgendeiner Symmetrie aufzeigen. [1)]

Körper durch Formen, Muster, Symmetriegruppen zu charakterisieren, ist eine ähnliche Abstraktion, wie Mengen durch Zahlen zu charakterisieren. Da die in der Natur vorhandenen Formen aber nicht durch ein Spiel von Zahlen zusammengehalten werden, ist es wichtig nach den konkreten Ursachen der Entstehung dieser Formen zu fragen. Verschiedene konkrete Ursachen können allerdings zu äquivalenten Formen, d.h. im Sinne der GT nicht unterscheidbaren Formen führen. Formen mit Symmetrie können da entstehen, wo Elemente des symmetrischen Körpers, z.B. Ionen im Kristall, Zellen im Pflanzenorgan miteinander in Wechselwirkung treten. Die Wechselwirkung, Interaktion muß für alle Elemente des Körpers qualitativ gleich sein, z.B. elektrostatische Felder im Ionenkristall oder Stoffaustauschfelder im Organismus. Die Elemente des Körpers können ihrerseits aus Teilchen bestehen und durch andere Wechselwirkungsfelder zusammengehalten sein, z.B. im Molekülkristall wird der Kristall durch van der Waals'sche Bindungen zusammengehalten, während das Molekül durch

kovalente Bindungen zusammengehalten wird.

Dabei können die einzelnen Elemente durchaus einen unterschiedlichen quantitativen Beitrag zum Interaktionsfeld leisten. Durch diesen unterschiedlichen quantitativen Beitrag der verschiedenen Elemente des Körpers kann eine große Vielfalt von Formen zustande kommen. So bewirken bei Ionenkristallen z.B. die verschiedenen Radienvervältnisse der einzelnen Ionen zueinander die unterschiedlichen Koordinationszahlen der Kristallgitter. Die Art der einzelnen Bausteine ist offen. So können Kristalle aus völlig verschiedenen Ionen den selben Kristallgittertyp besitzen.

In Organismen kann der Austausch von Substanzen zwischen einzelnen Zellen zum Entstehen von Verteilungsmustern dieser Substanzen führen. Der einfachste Fall ist ein Verteilungsgradient einer Substanz von einer Quelle oder Organoberfläche aus.

In der vorliegenden Arbeit wurde ein Reaktions-Transport-System (RTS) auf die Möglichkeit hin untersucht, Substanzverteilungsmuster zu bilden. Dabei war als Reaktionssystem ein Enzymsystem mit Substratinhibition vorgegeben.

Für viele Enzyme wird Substratinhibition (SI) angegeben. [2] Aber deren pk-Wert liegt meistens in einem Konzentrationsbereich des Substrats, der meines Wissens biologisch nicht relevant ist. Für zwei mit der Glycolyse verknüpfte Enzyme, die als Isoenzyme in der Natur vorkommen, werden allerdings pk-Werte angegeben, die physiologisch sind. Nämlich für die LDH aus dem Herzen gegenüber Pyruvat [3] und für die Hexokinase aus Amphibienleber Typ C mit Km = 0.05 mM gegenüber Glucose [4]. Für die Herz-LDH wird allerdings auch postuliert, daß sie Lactat zu Pyruvat dehydrogeniert, [5] und so gäbe es für diesen LDH Typ keine Substrat- sondern Produkt-Inhibition. Vielleicht kann diese Arbeit auch anregen, nach weiteren Enzymen zu suchen, die SI im physiologischen Bereich zeigen.

Prof. Dr. F.F. Seelig hat einen parametrisch universellen Oszillator konstruiert, dem ein Enzymsytem mit SI zugrunde liegt. Dieses Reaktionssystem ist als System mit negativer Vorwärtskopplung zu Hysteresevverhalten und unter geeigneten Bedingungen zu Oszillationen fähig. Ebenfalls läßt es die Möglichkeit zu, Substanzverteilungsmuster zu bilden. Dieses Reaktionssystem läßt sich auch noch relativ übersichtlich beschreiben und ist daher als Modell für wahrscheinlich viel kompliziertere Reaktions-Transport-Systeme in Organismen von systemtheoretischem Interesse.

Meine Untersuchungen gingen von diesem Reaktionssystem aus. Die Ergebnisse lassen sich aber unter einer gruppentheoretischen Interpretation so verstehen, daß sie im wesentlichen auch mit anderen nichtlinearen Reaktionssystemen zustande kommmen müssen. Deswegen wurden die gruppentheoretischen Erklärungen der Ergebnisse von mir so allgemein dargestellt, daß sie zu einer Vorhersage von Ergebnissen bei einem beliebigen Reaktionssystem brauchbar sind. Damit ist die Frage der Relevanz meiner Untersuchungen nicht an das mögliche Vorhandensein der Substratinhibition gebunden, sodern an die Frage:

Gibt es während der Ontogenese, bei der Entstehung von Strukturen, Mustern eine Phase, in der unter sich gleich-kompetente oder fastgleich-kompetente Zellen auftreten, die so miteinander in Wechselwirkung treten, daß sie sich nach der Phase ihrer gegenseitigen Beeinflussung voneinander unterscheiden?

Diese gegenseitige Beeinflussung muß auf einen nicht-linearen Mechanismus in jeder einzelnen Zelle treffen und von diesem Mechanismus beeinflußt werden. Ist ein chemischer Mechanismus Träger dieser Reaktion, so wird Substanztransport Träger der Wechselwirkung sein.

Die gruppentheoretische Verallgemeinerung gestattet also für verschiedene Organismen verschiedene Reaktions-Transport-Systeme, ja sogar im selben Organismus verschiedene RTS. Z.B. ist das RTS des cyclischen-AMP in der Übergangsphase von einzelzelliger zur vielzelligen Organisationsform bei dem zellulären Schleimpilz D. discoideum für die Wechselwirkung zwischen gleich-kompetenten Zellen verantwortlich [6].

Die gruppentheoretischen Methoden wurden allerdings soweit möglich am konkreten Modell des Reaktionssystems mit SI dargestellt, und numerische Ergebnisse nur für das RTS mit SI berechnet. Das RTS mit SI kann damit als Funktionsmodell einer Musterbildung, also einer Differenzierung gleich- oder fast-gleich-kompetenter Zellen betrachtet werden. In einem solchen Funktionsmodell läßt sich die Symmetrie-Gruppe des untersuchten Objekts als Bauplan betrachten, der Qualität und Form der Bausteine in weiten Grenzen offen läßt, aber vollständig die Art ihres Zusammenfügens bestimmt [1].

2. Vorbemerkungen

2.1. Allgemeine algebraische Vorbemerkungen zur Strukturbestimmung eines Systems mit Einführung der Begriffe : o - Algebra, Träger- oder Wirkungsmenge, Transformation, Gruppe, Darstellung.

Eine strukturierte Menge läßt sich mit Hilfe einer zuordbaren Algebra speziell einer Gruppe strukturmäßig bestimmen. Jeder Menge A läßt sich eine o - Algebra $\underline{A}$ im Sinne von Birkhoff (1935) zuordnen.

"Es seien A und Ω disjunkte Mengen und $\Omega = \bigcup_{n \in \mathbb{N}} \Omega_n$

eine Zerlegung von Ω in disjunkte Teilmengen Ω_n . Dann heißt $\underline{A} = (A, \alpha)$ eine Ω - Algbra genau dann, wenn $\alpha : \Omega \to \mathcal{O}(A)$ vermöge $\omega \mapsto \omega^{\alpha}$ eine Funktion von Ω in die Menge $\mathcal{O}(A)$ der Operationen in A ist, welche jedem "n-stelligen Operator" $\omega \in \Omega_n$ eine n-stellige Operation $\omega^{\alpha} \in \mathcal{O}(A)$ zuordnet:

$\omega^{\alpha} : A^n \to A$ vermöge $(a_1, \ldots, a_n) \mapsto a_1 \ldots a_n \omega^{\alpha}$;

wir bezeichnen also den Funktionswert von ω^{α} an der Stelle $(a_1, \ldots, a_n)$ hier mit $a_1 \ldots a_n \omega^{\alpha} \in A$. A heißt die Trägermenge von $\underline{A}$ " [7].

Ein-stellige Operationen sind z.B. Transformationen. Es läßt sich zu jeder Menge mindestens eine Algebra für ein-stellige Operationen finden. "Eine Transformation ist eine 1-1-deutige Abbildung einer Menge W auf sich. W heißt die Wirkungsmenge. Die Menge aller Transformationen mit der Zusammensetzungsvorschrift:

$$\bigwedge_{x \in W} f\,g\,(x) = f\,(g\,(x))$$

(d.h. das Hintereinanderausführen der beiden Transformationen g und f in der Reihenfolge zuerst g und dann f) bildet eine Gruppe, die sogenannte volle Transformationsgruppe von W. Untergruppen der vollen Transformationsgruppe von W heißen Transformationsgruppen von W.

Eine Transformation einer endlichen Wirkungsmenge W heißt Permutation, W besteht also aus N Objekten.

Die Gruppe aller Permutationen von N Objekten heißt symmetrische Gruppe S_N und hat die Ordnung $N!$. Untergruppen von S_N heißen Permutationsgruppen." [8,9]

So kann also jedenfalls jeder Menge wenigstens eine Gruppe zugeordnet werden. Der Gruppenbegriff bezieht sich hier also auf die Verknüpfungsvorschrift zwischen den Operatoren.

Für Gruppen gelten die folgenden Eigenschaften :

i. Eine Gruppe ist eine Menge M, auf der eine innere Verknüpfung T definiert ist; d.h. zu jedem Paar $(a,b) \in MxM$ gibt es genau ein Element $c \in M$ mit $aTb = c$.

ii. Gruppenaxiome.

g1. Es gilt das Assoziativgesetz: $(aTb)Tc = aT(bTc)$.

g2. Es existiert ein neutrales Element: $aTe = a$.

g3. Es gibt zu jedem Element ein inverses Element: $aTa^{-1} = e$.

Außerdem sind die folgenden Begriffe von Bedeutung:

i. Untergruppen sind Teilmengen U von M, die alle Gruppeneigenschaften mit der gleichen Verknüpfung T erfüllen.

ii. Die Ordnung einer Gruppe ist gleich der Zahl ihrer Elemente.

iii. Als Multiplikationstabelle bezeichnet man ein Schema, das alle Produkte aller Gruppenelemente enthält.

iv. Ein Element a heißt zu einem anderen b konjugiert, wenn gilt: $b = x^{-1}a\,x$, mit einem beliebigen Element x aus G.

v. Die Klasse der zu a konjugierten Elemente $x^{-1}\,a\,x$ besteht aus allen Elementen, die zu a konjugiert sind. Jede Gruppe läßt sich eindeutig in Klassen zerlegen. Die Klasse des neutralen Elements besteht nur aus diesem.

vi. Die Vereinigung aller ein-elementiger Klassen bildet eine Untergruppe, die das Zentrum der Gruppe heißt. Die Elemente des Zentrums sind mit allen Elementen der Gruppe vertauschbar.

vii. Die Anzahl der Elemente einer Klasse h_l heißt Ordnung der Klasse l.

viii. Die Klassensumme ist die Summe aller Elemente einer Klasse geteilt durch deren Ordnung h_l .

ix. Die Klassensummen sind untereinander und mit jedem Element der Gruppe vertauschbar.

x. Lassen sich die Gruppenelemente durch Matrizen darstellen, so sind die Spuren der Matrizen einer Klasse gleich. Die Spuren heißen Charaktere der Matrizen.

xi. Es sei r die Anzahl der Klassen konjugierter Elemente der Gruppe. Ein geordnetes Tupel aus den r Charakteren der Matrizen wird Charakter der Darstellung genannt.

xii. Durch die Untergruppen ist eine weitere Klasseneinteilung der Gruppe möglich. Ist x ein Element der Gruppe G , das nicht Element der Untergruppe U ist, so wird die Menge aller Elemente $z = x\,y$ (bzw. $v = y\,x$) Links- (Rechts-) nebenklasse nach U in G genannt, wenn y alle Elemente der Untergruppe U durchläuft. Nebenklassen sind keine Untergruppen. Die Nebenklassen enthalten genauso viele Elemente wie die Untergruppe nach der sie gebildet sind. Die Einteilung der Elemente einer Gruppe nach Nebenklassen einer Untergruppe ist disjunkt.

xiii. Die Anzahl der Links- (Rechts-) nebenklassen bezüglich U in einer endlichen Gruppe G wird Index von U in G genannt (indU). Es gilt nach dem Satz von Euler-Lagrange ordG = indU * ordU .

Ist die Träger- Wirkungsmenge strukturiert, d.h. gelten zwischen ihren Elementen bestimmte Beziehungen, so kann nur eine solche Algebra die Struktur erfassen, deren Elemente diese Beziehungen respektieren, d.h. die relationserhaltend sind.

Eine solche Algebra muß nicht unbedingt eine Gruppe sein. Es

gibt aber Gruppen mit solcher Eigenschaft. "Automorphismen sind umkehrbar eindeutige relationserhaltende Abbildungen des Raumes auf sich. Die Menge der Automorphismen bildet eine Gruppe. " [10)]

Um die Struktur einer strukturierten Menge zu bestimmen, müssen also u.a. deren Automorphismen-Gruppen - falls vorhanden - bestimmt werden. D.h. es müssen zuerst alle Operationen bestimmt werden, die die Menge in sich selbst abbilden und die mit der Struktur verträglich sind, also die Automorphismen und danach muß deren Verknüpfbarkeit und damit mögliche Gruppeneigenschaft untersucht werden. Bilden die Automorphismen eine Gruppe, so dient die Gruppentheorie zur Untersuchung der Struktur der Trägermenge.

Die oben erwähnte Funktion α von der Menge der Operatoren Ω in die Menge der Operationen $O(A)$ in A bedeutet auch, daß Operationen wie z.B. Automorphismen darstellbar sind.

"Unter einer linearen Darstellung der Gruppe verstehen wir einen Homomorphismus T der Gruppe G in die Gruppe $G(V)$ der regulären linearen Operatoren eines Vektorraums V . Der Vektorraum V wird der Darstellungsraum der Darstellung T genannt. Jede n-dimensionale Darstellung T einer Gruppe G definiert nach Wahl einer Basis B im Darstellungsraum V eine Matrizendarstellung $\underline{\underline{T}}$ von G ." [11)]

2.2. Konstruktion einer symmetrieangepaßten Basis.

2.2.1. Voraussetzung für die Zerlegung eines Operators auf einem strukturierten Vektorraum.

Durch die Wahl einer geeigneten Basis des Vektorraums läßt sich eine Zerlegung der Operatoren erreichen. Eine solche Basis ist ein Koordinatensystem, das der Symmetrie des Problems angepaßt ist.

Lineare Probleme mit Symmetrie lassen sich häufig mit Hilfe der Darstellungstheorie durch Zerlegung vereinfachen. Die theoretische Voraussetzung wird durch das Lemma von Schur geliefert. Diese läßt sich wie folgt formulieren: Voraussetzung: Gegeben sei eine Matrix $\underline{\underline{M}}$, die einen linearen Operator repräsentiert, der den Vektorraum V in sich abbildet, Außerdem sei eine Gruppe G gegeben, deren Darstellung $\underline{\underline{D}}(G)$ ebenfalls in dem Vektorraum V wirkt.

Satz: Eine Matrix $\underline{\underline{M}}$, die mit allen Matrizen einer irreduziblen Darstellung vertauschbar ist, ist eine konstante Matrix, also ein Vielfaches der Einheitsmatrix. Existiert eine nicht konstante Matrix, die mit allen Matrizen einer Darstellung vertauschbar ist, so ist die Darstellung reduzibel, andernfalls irreduzibel.

Es wird auch gesagt, daß eine Matrix $\underline{\underline{M}}$, die mit allen darstellenden Matrizen einer Gruppe vertauschbar ist, die Symmetrie der Darstelung hat. Das Schur'sche Lemma impliziert auch folgenden Satz: Hat eine Matrix $\underline{\underline{M}}$ die Symmetrie einer Darstellung, so ist jeder Eigenraum E_λ von $\underline{\underline{M}}$ zum Eigenwert λ invarianter Teilraum der Darstellung. [12)]

Eine Vereinfachung eines Problems im obigen Sinne ist es, einen Zerfall des Problems in invariante Teilräume zu erreichen, d.h. das Problem in mehrere Probleme kleinerer Dimension zu zerlegen.

2.2.2. Zerlegung des Darstellungsraums und dadurch hervorgerufene Zerlegung eines Operators .

Eine Darstellung eines Operators M , der in einem höherdimensionalen Vektorraum wirkt, läßt sich entsprechend den Voraussetzungen des Schur'schen Lemma zerlegen. Ist eine Zerlegung des Darstellungsraums möglich, so läßt sich jeder Vektor eindeutig in eine Summe von Vektoren bezüglich der Teilräume zerlegen z.B.: $\underline{x} = \underline{x}_1 + \underline{x}_2$; $\underline{x}_i \in V_i$.

Die Zerlegung erfolgt im allgemeinen über verschiedene Methoden zur Konstruktion von Projektionsoperatoren. Projektionsoperatoren sind Operatoren, die den Vektorraum so in die zugehörigen Teilräume abbilden, daß die Komponente jedes Vektors in sich selber abgebildet wird, die zu dem Teilraum des Projektionsoperators gehöhrt, und daß jede andere Komponente jedes Vektors annulliert wird.

D.h. es gilt: $\underline{\underline{P}}_i \underline{x}_i = \underline{x}_i$, $\underline{\underline{P}}_j \underline{x}_i = 0$ für jeden Vektor $\underline{x}_i \in V_i$

$\underline{\underline{P}}_i \underline{x}_j = 0$, $\underline{\underline{P}}_j \underline{x}_j = \underline{x}_j$ für jeden Vektor $\underline{x}_j \in V_j$.

Damit gilt für Projektionsoperatoren: $\underline{\underline{P}}_i^2 = \underline{\underline{P}}_i$ und $\underline{\underline{P}}_i \underline{\underline{P}}_j = 0$

sowie $\sum \underline{\underline{P}}_i = \underline{\underline{E}}$. [13)]

Eine Methode Projektionsoperatoren zu konstruieren beruht auf der Konstruktion von Eigenoperatoren, diese stimmen mit den Projektionsoperatoren bis auf einen Normierungsfaktor überein. [14)]
Zur Konstruktion der Eigenoperatoren wird sowohl eine Matrizendarstellung der Gruppe im n-dimensionalen Vektorraum als auch die Charakteren-Tafel der Gruppe benötigt. Zu jeder irreduziblen Darstellung gehört ein Eigen-Operator. Dieser Operator ist gleich der Produktsumme aus Klassensummen-Matrizen und dem Charakter der Darstellung.

Es gilt: $$\underline{\underline{\mathcal{E}}}_{\ell} = \sum_{j=1}^{r} \chi_{\ell j}\, \underline{\underline{\mathcal{C}}}_{j}$$

Hierbei ist: $\underline{\underline{\mathcal{E}}}_{\ell}$ die Matrizendarstellung des Eigenoperators zur l-ten irreduziblen Darstellung;

r die Anzahl der Klassen konjugierter Elemente;

$(\chi_{\ell 1}, \dots, \chi_{\ell r})$ der Charakter der l-ten irr. Darstellung;

$\underline{\underline{\mathcal{C}}}_{j}$ die Matrix der Summe aller Elemente der j-ten Klasse.

Die Eigenoperatoren stimmen bis auf einen Normierungsfaktor f_i mit den Projektionsoperatoren überein, f_i ist leicht zu bestimmen.

Aus $\underline{\underline{P}}_i = f_i\, \underline{\underline{\mathcal{E}}}_i$ folgt wegen $\underline{\underline{P}}_i^{\,2} = \underline{\underline{P}}_i$; $f_i^{\,2}\, \underline{\underline{\mathcal{E}}}_i^{\,2} = f_i\, \underline{\underline{\mathcal{E}}}_i$ bzw. :

$$f_i\, \underline{\underline{\mathcal{E}}}_i^{\,2} = \underline{\underline{\mathcal{E}}}_i$$

Die Projektionsoperatoren bilden die alte Basis in die neue symmetriegerechte Basis ab.

2.3. Zerlegung der Trägermenge unter der Wirkung der Gruppe .

Nicht nur bei der Zerlegung des wirkenden Operators in Operatoren kleinerer Dimension durch Transformation in eine symmetriegerechte Basis ist die Gruppentheorie von Bedeutung. Sie dient auch der Zerlegung der Wirkungs- oder Trägermenge zur Verkleinerung des zu untersuchenden Gebiets und damit zur Reduzierung des numerischen Rechenaufwands. Dazu werden hier die Begriffe Bahn und Fundamentalbereich eingeführt.

Jedem Punkt, z.B. im Zustands- oder sogar im Lösungsraum des Systems läßt sich eine Menge äquivalenter Punkte zuordnen. Durch eine solche Äquivalenzrelation läßt sich der Zustandsraum des Systems zerlegen.

Zwei Punkte s und t gelten als äquivalent, wenn es eine Transformation x aus der Gruppe G von s nach t gibt.

- Wegen der Gruppeneigenschaft G_3 : " Zu jedem Element x existiert ein inverses Element x^{-1} ." existiert auch die umgekehrte Transformation von t nach s . D.h. die Relation zwischen s und t ist symmetrisch.

- Wegen der Gruppeneigenschaft G_2 : " Es existiert ein neutrales Element." steht jeder Punkt mit sich selber in Relation. D.h. die Relation auf der Trägermenge ist reflexiv.
- Wegen der Gruppeneigenschaft G_o : " Eine Gruppe ist eine Menge auf der eine innere Verknüpfung T definiert ist. D.h. zu jedem Paar $(a,b) \in M \times M$ gibt es ein Element $c \in M$ mit $aTb = c$. " existiert eine Transformation z vom Punkt s zum Punkt r , wenn es in der Gruppe eine Transformation y von t nach r und eine Transformation x von s nach t gibt. D.h. die Relation zwischen r , s und t ist transitiv.

Damit induziert die Gruppe G auf der Trägermenge eine Äquivalenzrelation und diese führt zu einer Klasseneinteilung der Trägermenge. Die Äquivalenzklasse von s unter der Gruppe G , d.h. die Menge aller zu s äquivalenten Punkte, wird auch als Bahn oder Orbit oder Korona unter der Gruppe G bezeichnet. [15),16),17),18)]

Eine weitere mit der Zerlegung der Trägermenge in Bahnen zusammenhängende Aufteilung der Trägermenge ist die Aufteilung in Gebiete von nicht-äquivalenten Punkten. Dazu wird aus jeder Bahn aller Punkte der Trägermenge genau ein Punkt gewählt. Die Bahnen äquivalenter Punkte sind identisch. Die Bahnen der ausgewählten Punkte bedecken die ganze Trägermenge. Diese Punkte lassen sich zu einem Gebiet zusammenfassen. Werden die Transformationen der Gruppe auf dieses Gebiet angewandt, so wird die Trägermenge von den Bildern dieses Gebiets vollständig bedeckt. Ein solches Gebiet heißt Fundamental- oder Grund-bereich, oder es wird auch Zelle genannt.

Zur Untersuchung des Verhaltens eines Systems in der Trägermenge ist die Untersuchung eines Fundamentalbereichs ausreichend.

Das Erzeugen der Menge aller äquivalenter Lösungspunkte durch die Anwendung der Transformationen der Gruppe auf die im Fundamentalbe-

reich gefundenen Lösungspunkte ist eine Hüllenoperation. Diese Operation kann auch zur Prüfung der Güte eines numerischen Lösungsverfahrens verwendet werden. Ein gutes Lösungsverfahren muß im Gebiet mehrerer Fundamentalbereiche genauso viele Lösungen liefern wie die Kombination aus dem Lösungsverfahren in einem Fundamentalbereich und den Transformationen der Gruppe.

2.4. Charakterisierung und Klassifizierung von Lösungen mit Hilfe der Gruppe .

Unter den Punkten der Trägermenge zeichnen sich etliche dadurch aus, daß sie durch irgendeine Transformation der Gruppe auf sich selber abgebildet werden, z.B. durch die identische Transformation wird jeder Punkt auf sich abgebildet.

Jeder Symmetrieoperation (Transformation) der Gruppe läßt sich eine ausgezeichnete Menge von Punkten der Trägermenge zuordnen, die bei der Operation fest bleiben. Diese Menge wird Menge der Fixpunkte einer Operation oder auch Symmetrieelement dieser Operation genannt; z.B. die Spiegelebene bei einer Spiegelung im Raum.

Andererseits läßt sich auch jedem Punkt s die Menge aller Transformationen zuordnen, die den Punkt in sich selber überführen. Diese Transformationen bilden eine Untergruppe G_s der Gruppe G . Diese Untergruppe wird _Fix-_ oder Standgruppe von s genannt. Die Anzahl der Transformationen, die einen Punkt s auf sich abbilden, wird Ordnung der Standgruppe des Punktes s $|G_s|$ genannt. Auf jeder Bahn liegen nur Punkte, deren Standgruppen die gleiche Ordnung haben. Jede Bahn enthält ebenso viele Punkte wie es Linksnebenklassen in G nach G_s gibt.[15)] Die Anzahl der Punkte einer Bahn heißt Ordnung der Bahn.

Damit folgt ein Satz von H. Wielandt [17] :

Das Produkt aus Ordnung der Bahn und Ordnung der Standgruppe ist gleich der Ordnung der Gruppe :

$$O_b * |G_s| = |G| .$$

In gewisser Weise haben Punkte, deren Standgruppenordnung $|G_s|$ größer als eins ist, eine innere Symmetrie; sie liegen in den Symmetrieelementen von Operationen. Diese innere Symmetrie kann zur Charakterisierung dienen; d.h. die Standgruppe eines Punktes charakterisiert diesen Punkt. Die Menge der Punkte mit gleicher innerer Symmetrie, d.h. mit gleicher Standgruppe soll Fixpunktmenge der Standgruppe heißen. - Fixpunktmengen verschiedener Standgruppen können in gewissen Fällen als äquivalent angesehen werden: Unter der Wirkung der Gruppe G gibt es für die Fixpunktmenge jeder Standgruppe eine Bahn. Fixpunkte, die auf derselben Bahn liegen, sind äquivalent.

Eine vollständige Klassifizierung der möglichen Lösungsmenge ist erreichbar durch die Konstruktion des Untergruppenverbandes der Gruppe G . Zu jeder Untergruppe (UG) wird der Durchschnitt der Symmetrieelemente der Oprationen der UG bestimmt, das ist die Fixpunktmenge der UG. Gehören zu UGn verschiedener Ordnung dieselben Fixpunktmengen, so ist die UG mit der höchsten Ordnung Standgruppe zu dieser Fixpunktmenge. D.h. es lassen sich den UGn des UG-Verbandes mit abnehmender Ordnung, angefangen von der Gruppe G , Fixpunktmengen zuordnen. So ist z.B. die Gruppe G Standgruppe eines möglichen Symmetriezentrums, und die UG, die nur die identische Transformation enthält, ist Standgruppe des allgemeinen Elements der Trägermenge.

3. Das Gleichungssystem.

3.1. Das Reaktions - System.

Das Reaktionssystem ist theoretisch mit dem Ziel konstruiert worden, ein Modell für ein schaltbares chemisches System zu erhalten (Seelig) [19].

Schaltbare Systeme müssen über mindestens zwei stabile und einen dritten sie trennenden instabilen Zustand verfügen. Solche einfachen bistabilen Schaltungen werden auch Flip-Flop genannt und zeigen hystereseartiges Verhalten. D.h. jeder der beiden stabilen Zustände ist so stabil, daß er Störungen in Richtung des andern echt nachgibt, wenn sie einen Schwellenwert übersteigen. Damit ist der Weg zwischen beiden Zuständen von der Vorgeschichte abhängig. Das System hat ein gewisses Beharrungsvermögen. In der Elektronik dient dieses Verhalten von z.B. Magneten zur Informations-speicherung und -verarbeitung.

Nicht-lineare offene chemische Systeme können interessantes Verhalten zeigen.

Das hier angegebene Reaktionssystem besteht aus:

i) einer Enzymreaktion, bei der ein aktiver Enzym - Substrat - Komplex ES und ein passiver ES_2 angenommen ist. D.h. es gibt eine maximale Umsatzgeschwindigkeit für einen schmalen Substratkonzentrationsbereich; oberhalb und unterhalb herrscht geringe Umsatzgeschwindigkeit.

Katalytische Systeme ohne Inhibition mit einem Enzym und einem Substrat lassen sich beschreiben, durch das folgende Differentialgleichungssystem :

$$\dot{[s]} = -k_s \cdot [s] \cdot [e] + k_{-s} \cdot [es] \qquad (1)\ ,$$

$$\dot{[es]} = k_s \cdot [s] \cdot [e] - k_{-s} \cdot [es] - k_p \cdot [es] \qquad (2)\ ;$$

und die Erhaltungsgleichung :

$$[e_{ges}] = [es] + [e] \qquad (3)\ .$$

Da die Enzymkonzentration $[e]$ und $[es]$ im Vergleich zur Substratkonzentration $[s]$ im allgemeinen sehr klein ist, befindet sich das Enzym relativ zum Substrat immer fast im Gleichgewicht, so daß $\dot{[es]} = 0$ angenommen werden darf, damit bleibt als einzig relevante Differential-Gleichung (DGl) übrig :

$$\dot{[s]} = - k_p \cdot [e_{ges}] \cdot \frac{[s]}{[s] + k_m} \qquad (4),$$

mit $k_m = \frac{k_{-s} + k_p}{k_s}$ der Michaelis-Konstanten, $k_p \cdot [e_{ges}]$ läßt sich zu der Konstanten v_{max} zusammenfassen.

Die Berüksichtigung der Substratinhibition führt zu einem Term 2. Ordnung in $[s]$ im Nenner :

$$\dot{[s]} = \frac{- k_p \cdot [e_{ges}] \cdot [s]}{(1 + \frac{k_i}{k_{-i}} [s]) [s] + k_m} \qquad (5),$$

wobei k_i bzw. k_{-i} die Reaktionskonstanten zwischen dem aktiven und passivem Enzymkomplex und k_m , wie oben, die Michaelis-Konstante des aktiven Enzymkomplexes bedeutet.

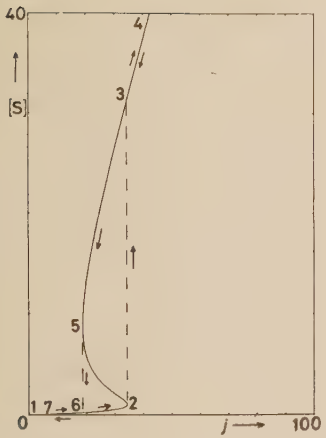
ii) einer Reaktion 1. Ordnung als zusätzlicher Abfluß von Substrat; dadurch ensteht ein Minimum in der Reaktionsgeschwindigkeit, weil bei großen Substratkonzentrationswerten diese Reaktion die inhibierte Enzymreaktion überwiegt.

iii) Das Substrat wird durch einen konstanten Zufluß aus einem Pool in die Reaktion geliefert, dadurch ergibt sich ein Steuerungsparameter für die Reaktion.

Eine Grafik, die diesen Fluß als Eingangsgröße und die Konzentration des Substrats in der Reaktion als Ausgangsgröße gegeneinander aufträgt, zeigt das gewünschte Hystereseverhalten. Bei gleichem Zufluß j ist die Ausgangsgröße $[s]$ eine teilweise mehrdeutige Funktion von j . Bei Vergrößerung und Verkleinerung von j wird die Hystereseschleife in der Reihenfolge 1 bis 7 durchlaufen (nach Seelig).

Abb. 3.1.1.

Hystereseverhalten eines Reaktions-Systems.



$f(j,[s]) = 0$

Der Zufluß j, die äußere Steuerung des Systems, ist die Eingangsgröße; die Substratkonzentration in der Reaktion $[s]$ ist die Ausgangsgröße.

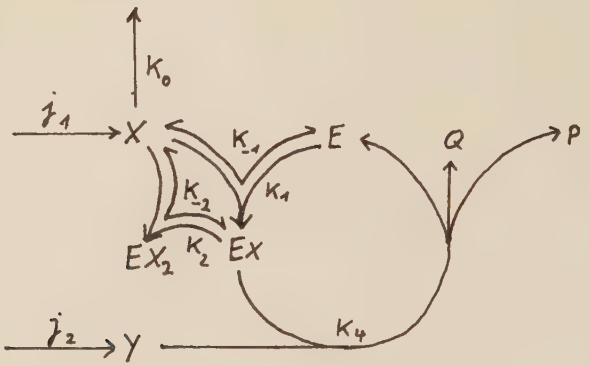
Die Gleichung $v+j-r([s])-k_o\cdot[s]=0$ läßt sich für den stationären Fall, $\dot{[s]} = 0$ durch die implizite Gleichung $f(j,[s]) \equiv j-r([s])-k_o\cdot[s]=0$ darstellen; die Reaktionsgeschwindigkeit v ist der Betrag von $\dot{[s]}$, der Reaktionsterm $r([s])$ ist der Betrag der rechten Seite von Gleichung (5) und $k_o\cdot[s]$ ist der Abfluß entsprechend der Bedingung ii). $f(j,[s]) = 0$ ist eine teilweise mehrdeutige Funktion von j. Das Mittelstück der Kurve zwischen den Punkten 2 und 5, d.h. das Stück mit negativer Tangentensteigung (Ts), stellt den instabilen stationären Bereich dar. Die Ausgangsgröße $[s]$ folgt der Kurve $f(j,[s]) = 0$ nur in den Kurvenstücken (Kst) mit positiver Ts, das sind die stabilen Kst. Nach Überschreiten der Punkte mit senkrechter Tangente wechselt die Ausgangsgröße auf das andere stabile Kst über. In dem Wertebereich von j, in dem zwei stabile und ein instabiles Kst existieren, tritt Hysterese auf.

iv) Der Reaktionspartner des Substrats wird nur durch einen konstanten Zufluß geliefert. Damit ergibt sich eine weitere Steuermöglichkeit.

Weitere einschränkende Annahmen z.B. über den Reaktionsmechanismus wurden nicht gemacht.

Abb. 3.1.2.

Das Reaktionsschema des parametrisch universellen Oszillatormodells (nach Seelig) [19] .



Das Reaktionssystem verfügt damit über drei steuerbare Größen, nämlich die beiden Zuflüsse und die Gesamtkonzentration an Enzym. Die übrigen 6 Parameter sind bei natürlich vorkommenden Systemen fest vorgegeben. Damit gilt das folgende Gleichungssystem :

$$\dot{[x]} = j_1 - k_o \cdot [x] - r \quad ,$$

$$\dot{[y]} = j_2 - r \qquad (6) \; .$$

In den Reaktionsterm r muß wegen der zweiten Substanz y statt der Reaktionskonstante k_p das Produkt $k_4 \cdot [y]$ eingesetzt werden. Statt der Indizes s und i werden jetzt die Indizes 1 und 2 verwendet;

$$r = \frac{k_4 \cdot [e_{ges}] \cdot [x] \cdot [y]}{\left(1 + \frac{k_2 \cdot [x]}{k_{-2}} \right) \cdot [x] + \frac{k_{-1}}{k_1} + \frac{k_4 \cdot [y]}{k_1}} \; .$$

Durch Einführung geeigneter dimensionsloser Variablen und Parameter läßt sich das Gleichungssystem auf ein System mit 2 festen und 3 steuerbaren Parametern transformieren.

Eine solche Transformation besteht z.B. aus den folgenden Gleichungen für

die Variablen :

$$\tau = k_o\, t\,, \qquad \xi = \frac{k_1}{k_{-1}}\,[x]\,, \qquad \eta = \frac{k_4}{k_{-1}}\,[y] \qquad (7),$$

für die nicht steuerbaren Parameter :

$$\alpha = \frac{k_4}{k_1}\,, \qquad \mathcal{H} = \frac{k_{-1}\,k_2}{k_1\,k_{-2}} \qquad (8),$$

für die steuerbaren Parameter :

$$\varphi = \frac{k_1}{k_o\,k_{-1}}\,j_2\,, \qquad \chi = \frac{k_1}{k_o\,k_{-1}}\,(j_1 - j_2)\,, \qquad \gamma = \frac{k_{-1}}{j_2}\,[e_{ges}] \qquad (9),$$

Das DGlS mit dimensionslosen Größen lautet damit :

$$\dot{\xi} = \varphi + \chi - \xi - \rho\,,$$
$$\dot{\eta} = \alpha\,(\varphi - \rho)\,,$$

mit dem Reaktionsterm :

$$\rho = \gamma \cdot \varphi\,\frac{\xi \cdot \eta}{1 + \xi + \mathcal{H}\,\xi^2 + \eta} \qquad (10)$$

Dieses DGlS verfügt über einen stationären Zustand, nämlich für $\rho = \varphi$ folgt :

$$\xi_{sz} = \chi\,, \quad \eta_{sz} = \frac{1 + \chi + \mathcal{H}\,\chi^2}{\gamma\,\chi - 1} \qquad (11)$$

Durch räumliche Kopplung von zwei solchen Reaktionssystemen entsteht ein Flip-Flop-System. Wird die räumliche Kopplung durch Permeation erreicht, ist eine weitere Steuerung des Systems möglich, wogegen bei Diffusion weitere nicht steuerbare Parameter eingeführt werden. Zeitliche Untersuchungen des Systems ohne räumliche Kopplung führen zu Parameterräumen, in denen das System sich als Ozsillator verhält.

3.2. Das Transportsystem.

3.2.1. Eigenschaften eines Mediums.

Bei realistischen Reaktionssystemen läßt sich die Untersuchung im allgemeinen nicht auf das zeitliche Verhalten einschränken. Da nicht alle Reaktionen an einem Punkt stattfinden, muß die Ausdehnung des Systems mit in die Betrachtung einbezogen werden. Wir können sagen, die Reaktionen finden in einem Medium statt. Dem Medium werden im Modell bestimmte Eigenschaften zugesprochen, die etwa das folgende berücksichtigen müssen:

Die Wirkung der Reaktionen an verschiedenen Orten aufeinander läßt sich durch den Transport von Substanzen und/oder Energie erklären. Systeme, die ideal durchmischt sind, verhalten sich wie Systeme ohne Ausdehnung.

In dem hier untersuchten Modell wird das Medium mit folgenden Eigenschaften ausgestattet:

i. Es besteht aus Zellen. D.h. es ist kompartementiert.

ii. Die Zellen stehen miteinander in Beziehung.

iii. In jeder Zelle sorgt ein Vorgang dafür, daß sich im Innern keine Inhomogenitäten aufbauen können.

iv. Jede Zelle enthält das gleiche chemische Reaktionssystem.

v. Zwischen zwei benachbarten Zellen findet ein Stoffaustausch statt; dieser wird von den Membraneigenschaften kontrolliert. Je nach Durchlässigkeit der Membran können Inhomogenitäten über die Membran auftreten.

vi. Das Reaktionssystem in jeder Zelle ist ein offenes System. Es hat Zu- und Abfluß.

Charakteristisch für dieses Modell ist, daß die wesentlichen Eigenschaften des Mediums als in den Grenzen der Zellen, den Membranen, konzentriert vorgestellt werden. Systeme mit solcher Eigenschaft werden Systeme

mit konzentrierten Parametern genannt. Zu ihrer Beschreibung dienen gewöhnliche Differentialgleichungen.

Die Eigenschaft iii. des Mediums stellt die stärkste Abweichung von realistischen Medien dar. Wenn sie fallen gelassen wird, sind Transporteigenschaften zu berücksichtigen, die sich über das ganze Medium verteilen, und die das Rechnen mit partiellen Differentialgleichungen erfordern. Eine ständige Zunahme der Zahl der Zellen in einem Gebiet kann als Approximation an diesen Fall dienen.

Der Stoffaustausch über die Kompartementgrenze wird Permeation genannt. Die Beziehung der Zellen zueinander läßt sich mit dem folgenden Zeitgesetz beschreiben : $d x_i / d t = - \sum_j p_{xij} (x_i - x_j)$. Die Konzentration der Substanz x in dem Kompartement i wird von allen Nachbarzellen j beeinflußt und beeinflußt auch diese. Als Nachbarzellen werden solche Zellen verstanden, die mit der Zelle i eine gemeinsame Grenze, Membran haben. Die Membran hat die Eigenschaft, die Substanz x mit der Permeationskonstante p_{xij} durchzulassen. Die Membranen, die Zelle i von ihren Nachbarn j trennen, müssen nicht alle gleich sein, das drückt sich im Index ij aus. Diese Modellmembranen entsprechen im Detail nicht den biologischen Verhältnissen; nämlich zwei Doppelschichtmembranen mit dazwischenliegendem Interzellularraum. Aber diese Details sind mit dem Modell vereinbar.

3.2.2. Das Vier-Kompartement-System.

Ein noch einigermaßen übersichtliches Transportsystem mit konzentrierten Parametern besteht aus 4 Kompartementen. Hier wird eine symmetrische Anordnung von 4 Kompartementen untersucht. Für die räumliche Anordnung gelten folgende Spezialisierungen :

i. Jedes Kompartement steht zu den übrigen dreien in Beziehung. Und zwar sind je zwei ihm benachbart und eines ist ihm nicht benachbart. D.h. alle Kompartemente sind gleichberechtigt.

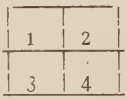
ii. Für das Nachbarsein gibt es zwei Fälle :

a) Die Nachbarn jeder Zelle sind ihr gleichwertig benachbart; d.h. die trennenden Membranen haben gleiche Durchlässigkeit.

b) Die Nachbarn jeder Zelle sind ihr unterschiedlich benachbart; d.h. die trennenden Membranen haben unterschiedliche Durchlässigkeit.

Der Fall b) ist in gewisser Weise allgemeiner.

Die 4 Kompartemente werden mit Indizes versehen und lassen sich dann folgendermaßen darstellen :



p_h Abb.(3.2.1.) .

p_v

Die Beziehungen zwischen den Zellen werden durch die Membrandurchlässigkeiten d.h. die Permeationskonstanten bestimmt. Die physikalische Dimension der p_j ist 1/ Zeit. Auch hier lassen sich dimensionslose Größen gewinnen : $p_j^* = p_j / k_o$ (3.2.1.).

Die Indizes v bzw. h beziehen sich auf die Lage der betrachteten Membran : v meint die vertikal bzw. h die horizontal liegende Membran; d.h. die Membran zwischen linken und rechten bzw. zwischen oberen und unteren Zellen. Für jede Substanz x gibt es unterschiedliche p_v und p_h . D.h. es ist ein zweiter Index nötig, um die betrachtete Substanz zu berücksichtigen; z.B. p_{vy} .

Den Konzentrationen einer Substanz in den verschiedenen Kompartementen läßt sich ein Vektor zuordnen : $\underline{x}^T = (x_1, x_2, x_3, x_4)$. So läßt sich das Differentialgleichungssystem des reinen Transports für jede Substanz x gesondert als lineares Gleichungssystem mit einer Transportmatrix $\underline{\underline{T}}$ darstellen : $\underline{D}(\underline{x}) = \underline{\underline{T}} \cdot \underline{x}$ (2) .

Im Fall b) hat die Transportmatrix die folgende Gestalt :

$$\underline{\underline{T}} = \begin{pmatrix} -(p_v+p_h) & p_v & p_h & o \\ p_v & -(p_v+p_h) & o & p_h \\ p_h & o & -(p_v+p_h) & p_v \\ o & p_h & p_v & -(p_v+p_h) \end{pmatrix} \quad (3).$$

Die Matrix $\underline{\underline{T}}$ enthält zwei Parameter und ist symmetrisch.

Im Fall a) enthält die Transportmatrix nur einen Parameter, $p_v = p_h$:

$$\underline{\underline{T}} = \begin{pmatrix} -2p & p & p & o \\ p & -2p & o & p \\ p & o & -2p & p \\ o & p & p & -2p \end{pmatrix} \quad (4).$$

Für das reine Transportsystem ist jede beliebige homogene Substanzverteilung stationär. Das System mit Reaktion und Transportkopplung bringt interessante Ergebnisse.

3.2.3. Allgemeine Symmetriebetrachtungen für das Reaktions-Transport-System.

Das Reaktionstransportsystem läßt sich durch eine Operatorgleichung darstellen : $\mathcal{D}(\underline{x}) = \mathcal{F} + \mathcal{R}(\underline{x}) + \mathcal{T}(\underline{x})$ (5).

Hier muß der Vektor $\underline{x}$ über alle Substanzen z.B. x und y und alle Kompartemente j gebildet werden ; $\underline{x}^T = (x_1, y_1, x_2, y_2, x_3, y_3, x_4, y_4)$.

$\mathcal{D}$ ist der Differentialoperator, d.h. der Differentialquotient nach der Zeit für jede Vektorkomponente gesondert.

$\mathcal{R}(\underline{x})$ ist die Reaktion, deren Anteil $\mathcal{R}_j$ nach (Kap. 3.2.1.(iv)) für jede Zelle j gleichartig ist. In der Reaktion sind keine Kopplungen zwischen den Zellen vorhanden. $\mathcal{R}$ ist hauptsächlich für die Dynamik verantwortlich - wegen des nicht-linearen Zusammenhangs mit den Konzentrationen.

$\mathcal{F}$ ist der konstante, von $\underline{x}$ unabhängige Zufluß.

$\mathcal{T}(\underline{x})$ ist der Transport zwischen den Zellen, der allein für die Kopplung verantwortlich ist und daher im vorliegenden Fall allein die Symmetrie bestimmt. Alle Zeilen, Spalten, der darstellenden Matrizen $\underline{\underline{T}}$ lassen sich durch bestimmte Permutationen der Elemente einer einzigen Zeile, Spalte, der jeweiligen Matrix gewinnen.

3.2.4. Bestimmung der zulässigen Symmetrie-Operationen.

Die Symmetrieeigenschaften eines Systems lassen sich mit Hilfe der zulässigen Symmetrie-Operationen (SO) angeben. Es sind nur solche SO zulässig, die die wesentlichen Systemeigenschaften invariant lassen; nämlich hier die mit Nachbarschaft bezeichnete Beziehung der Zellen zueinander. D.h. solche Operationen sind zulässige SO , die auf der Menge der Zellen operieren und nicht auf der Menge der Beziehungen zwischen ihnen. Die Anordnung der Indizes der Zellen ist willkürlich, d.h. unwesentlich, aber wichtig für die gewählte Darstellung; wesentlich ist aber auch, daß die Zellen unterscheidbar sind. Es müssen alle Anordnungen der Indizes, die durch irgendeine Permutation aus einer beliebigen Anordnung hervorgehen äquivalent sein, d.h. äquivalente Darstellungen erzeugen.

Zu jeder Operation, die auf die Menge der Zellen wirkt, läßt sich eine Permutation der Indizes kombinieren, so daß die Anordnung der Nummerierung der Zellen festbleibt. Diese Permutation ist eine Darstellung der Operation in Bezug auf die gewählte Anordnung der Indizes.

Operationen, die auf die gesamte Menge der Zellen - (global auf das Zellaggregat) - wirken, sind SO des Zellaggregats.

Zulässige SO für das Zellsystem sind nur solche globalen Operationen, bei denen nach einer Permutation der Indizes die Beziehungen zwischen den Zellen und die Nummerierung der Zellen invariant bleiben. Dazu einige Beispiele bezogen auf die in Abb. 3.2.1. gewählte Indizierung:

i So verstößt eine Rotation um 90° bei unterschiedlichen Membranen gegen die Erhaltung der Nachbarschaft, da jetzt z.B. Zelle 1 durch die Beziehung p_h mit der Zelle 2 in Relation steht. Bei gleichen Membranen ist das eine zulässige SO.

ii Eine Vertauschung der Zellen 3 und 4 bei Beibehaltung der Lage der Zellen 1 und 2 ist keine Operation, die global auf das System wirkt.

iii Dagegen führt bei gleichen Membranen eine Spiegelung von 1 auf 4 zu keinem Verstoß gegen bestehende Nachbarschaftsbeziehungen, ist also zulässig.

Die Menge der zulässigen SO ist isomorph zu einer Untergruppe der symmetrischen Gruppe der Permutationen über 4 Elemente. Im Falle gleicher Membranen ist das eine D_4 -Gruppe, im Falle unterschiedlicher Membranen eine D_2 -Gruppe.

Ebenso wie sich die Zulässigkeit oder Nichtzulässigkeit von Operationen als SO in Bezug auf die Invarianz des Zellsystems bestimmen läßt, kann sie auch in Bezug auf das zugehörige Gleichungssystem bestimmt oder überprüft werden.

Allgemein läßt sich sagen : Nur solche Kongruenz-Abbildungen sind zulässige SO, die auf den Vektor der Variablen angewandt, das Gleichungssystem (GlS) im wesentlichen invariant lassen. Die Kongruenz-Abb. lasssen sich als Kompositionen aus Bewegungen und Spiegelungen darstellen; Bewegungen sind Verschiebungen - Translationen - und Drehungen. Z.B. für eine einzelne Gleichung, Funktion (F) mit 2 Variablen gilt; eine F heißt: 1. eine gerade F, wenn sie gegenüber einer Spiegelung an der y-Achse invariant ist; 2. eine ungerade F, wenn sie gegenüber einer Drehung um 180° am Ursprung invariant ist; 3. eine periodische F, wenn sie gegenüber einer Translation invariant ist. Die reinen Kongr.-Abb. , Drehungen

und Spiegelungen, lassen sich durch orthogonale Matrizen darstellen.

Im wesentlichen invariant kann für ein GlS bedeuten, daß nur die willkürlich wählbare Anordnung der einzelnen Gleichungen des GlS zueinander und/oder ein ausklammmerbares willkürliches Vorzeichen einer einzelnen Gleichung in eine andere mögliche willkürlich wählbare Anordnung/ Vorzeichen verändert wird.

Solche Veränderungen sind durch Permutationen oder Transformationen mit einer monoidalen Matrix aufhebbar, die auf die Anordnung und/oder das Vorzeichen der Zeilen des GlS wirkt.
Eine monoidale Matrix ist eine Matrix, bei der in jeder Zeile und Spalte nur ein Wert vom Betrag 1 steht.

Die SO bilden die Elemente der Trägermenge auf sich ab. Wenn wie hier die Trägermenge aus einer endlichen Anzahl diskreter Elemente besteht und jedem Element ein Index zugeordnet wird, entsprechen den SO bestimmte Permutationen dieser Indizes. Für das DGlS dieses RTS bedeutet das, daß alle Permutationen zwischen gleichwertigen Variablen (hier sind die Variablen der selben Substanz in den verschiedenen Kompartementen gleichwertig) daraufhin zu überprüfen sind, ob durch ihre Ausführung das GlS im wesentlichen invariant bleibt, also durch eine Umordnung der Zeilenanordnung in die willkürliche Ausgangsanordnung zurückführbar ist.

Im Spezialfall eines linearen DGlS gilt die Folgerung aus dem Schur'schen Lemma.

Dazu ein Beispiel: Es sei das DGlS $\dot{\underline{x}} = \underline{\underline{D}}\,\underline{x} = \underline{\underline{T}}\,\underline{x}$ und $\underline{\underline{C}}$ die Permutations-Matrix einer Operation gegeben. Die Anwendung der Operation auf den Variablenvektor führt zu: $\underline{\underline{D}}\,\underline{\underline{C}}\,\underline{x} = \underline{\underline{T}}\,\underline{\underline{C}}\,\underline{x}$.
Die Matrizendarstellung des Differentialoperators $\mathfrak{D}$ ist die konstante Matrix $\underline{\underline{D}} = \frac{d}{dt}\,\underline{\underline{E}}$. Eine konstante Matrix ist mit jeder andern Matrix

vertauschbar : $\underline{\underline{D}}\,\underline{\underline{C}}\,\underline{x} = \underline{\underline{C}}\,\underline{\underline{D}}\,\underline{x}$. Daraus folgt : $\underline{\underline{C}}\,\underline{\underline{D}}\,\underline{x} = \underline{\underline{C}}\,\dot{\underline{x}} = \underline{\underline{T}}\,\underline{\underline{C}}\,\underline{x}$.

Ist $\underline{\underline{C}}$ die Matrizendarstellung einer zulässigen SO, so gibt es einen Operator C^{-1}, der auf die Zeilen des DGlS angewandt, dieses in die ursprüngliche Anordnung zurückführt. Es muß für $\underline{\underline{C}}$ also gelten:

$\underline{\underline{C}}^{-1}\ \underline{\underline{C}}\,\dot{\underline{x}} = \dot{\underline{x}} = \underline{\underline{C}}^{-1}\ \underline{\underline{T}}\,\underline{\underline{C}}\,\underline{x} = \underline{\underline{T}}\,\underline{x}$; d.h. es muß also gelten:

$\underline{\underline{C}}^{-1}\ \underline{\underline{T}}\ \underline{\underline{C}} = \underline{\underline{T}}$, daraus folgt: $\underline{\underline{T}}\,\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{C}}\,\underline{\underline{T}}$, $\underline{\underline{T}}\,\underline{\underline{C}} - \underline{\underline{C}}\,\underline{\underline{T}} = \underline{\underline{0}}$.

D.h. zulässig sind nur solche Operationen C , die mit dem Operator des DGlS vertauschbar sind; d.h. der lineare Operator $\mathcal{T}$ hat die Symmetrie der Gruppe aller zulässigen SO.

Anmerkung : Es lassen sich zusammenfassende Ausdrücke für das nicht lineare DGlS (NL-DGlS) einführen : $z_i^T = (\xi_i, \eta_i)$,

$\dot{z}_i^T = (\dot{\xi}_i, \dot{\eta}_i)$, $f^T = (\varphi + \chi, \alpha\varphi)$, $h_i(z_i)^T = (\xi_i + \varsigma(z_i), \alpha\varphi(z_i))$.

Für die Elemente der Transportmatrix $\underline{\underline{T}}$ wird das zusammenfassende Element

$$t_{ij} = \begin{pmatrix} t_{ij}\,(\,p_{ix}\,,\,p_{jx}\,) & o \\ o & t_{ij}\,(\,p_{iy}\,,\,p_{jy}\,) \end{pmatrix} \qquad \text{(An.2)}$$

eingeführt, das ist ein 2,2-Matrixkästchen aus den jeweiligen Elementen der Transportmatrizen der beiden Substanzen ξ und η . Für alle zusammenfassenden Ausdrücke wurde auf die übliche einfache bzw. doppelte Unterstreichung für Vektoren bzw. Matrizen verzichtet. Das NL-DGlS läßt sich dadurch in folgender Form darstellen :

$$\begin{pmatrix} \dot{z}_1 + h_1(z_1) - f \\ \dot{z}_2 + h_2(z_2) - f \\ \dot{z}_3 + h_3(z_3) - f \\ \dot{z}_4 + h_4(z_4) - f \end{pmatrix} = \underline{\underline{T}} \cdot \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \end{pmatrix} \qquad \text{(An.3).}$$

Die Ausdrücke $\dot{z}_i + h_i(z_i) - f$ lassen sich zu $g_i(z_i)$ zusammenfassen und aus den g_i bzw. z_i ein Vektor $\underline{g}$ bzw. $\underline{z}$ bilden. Das umgeschriebene GlS lautet jetzt : $\underline{\underline{E}}\ \underline{g}(\underline{z}) = \underline{\underline{T}}\ \underline{z}$.

Dieses GlS ist formal damit vollständig in ein lineares GlS überführt und dem lin. DGlS des reinen Transports vergleichbar. Alle Nichtlinearitäten stecken im Vektor $\underline{g}(\underline{z})$, sind hier aber nicht explizit auffällig. Die Elememnte des Vektors $\underline{g}(\underline{z})$, $g_i(z_i)$, sind jeweils nur von einem z_i abhängig. Interaktionen zwischen den verschiedenen z_i werden nur durch den Transport hervorgerufen.

Nur die mit dem Operator $\mathcal{T}$ vertauschbaren SO sind zulässige SO für das zuuntersuchende NL-DGlS. Darum ließ sich oben auch sagen, daß hier der lineare Transportoperator allein die Symmetrie bestimmt.

Die Matrix $\underline{\underline{T}}$ hat die Eigenschaft, daß alle ihre Zeilen/Spalten durch bestimmte Permutationen der Elemente einer einzigen Zeile/Spalsich erzeugen lassen. Diese Permutationen bewirken bei Anwendung auf ganze Spalten eine Umstellung ganzer Zeilen. Das Beispiel ii. für die nicht-zulässige Vertauschung der Kompartemente 3 und 4 zeigt auch, daß das NL-DGlS bei dieser Operation so verändert würde, daß keine Zeilenumstellung es in die ursprüngliche Anordnung zurückbringt.

Alle mit der Matrix $\underline{\underline{T}}$ vertauschbaren regulären Matrizen $\underline{\underline{C}}$ genügen der folgenden Matrizengleichung $\underline{\underline{C}}\ \underline{\underline{T}} - \underline{\underline{T}}\ \underline{\underline{C}} = \underline{\underline{0}}$. Die Elemente von $\underline{\underline{C}}$ werden mit c_{ik} bezeichnet. Es ergeben sich n^2 lineare Gleichungen zur Bestimmung dieser n^2 Unbekannten. Für die Matrix $\underline{\underline{T}}$ im Fall a) folgt :

$$\underline{\underline{C}} = \begin{pmatrix} c_1 & c_3 & c_4 & c_2+c_6-c_1 \\ c_5 & c_2 & c_6 & c_3+c_4-c_5 \\ c_3+c_4-c_5 & c_6 & c_2 & c_5 \\ c_2+c_6-c_1 & c_4 & c_3 & c_1 \end{pmatrix}. \qquad \text{(An.4).}$$

Alle Matrizen der Form $\underline{\underline{C}}$ sind mit der Matrix $\underline{\underline{T}}_a$ vertauschbar. Alle mit einer Matrix $\underline{\underline{T}}$ vertauschbaren Matrizen $\underline{\underline{A}}$ bilden eine Darstellung der Automorphismengruppe (AG) dieser Matrix :

$$\underline{\underline{A}}\,\underline{\underline{T}} - \underline{\underline{T}}\,\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{0}} \iff \underline{\underline{T}}^{-1}\,\underline{\underline{A}}\,\underline{\underline{T}} = \underline{\underline{A}} \; .$$

Zur Bestimmung der AG des Gleichungssystems, das ist die Gruppe der zulässigen SO, ist diejenige Untergruppe der AG der Matrix zu bestimmen, die noch die Bedeutung der Variablen invariant läßt; d.h. hier bedeuten die Variablen Konzentrationen der chemischen Substanzen in den verschiedenen Kompartementen. Diese Bedeutung bleibt nur erhalten, wenn die Matrizen der AG des GlS Permutationsmatrizen sind. Diese Gruppe von Permutationen ist die gesuchte Gruppe der zulässigen SO des GlS. Hier gilt sogar : die Bahn von einer (zwei; entsprechend der Anzahl der beteiligten Substanzen) Gleichung(en) unter der Gruppe der zulässigen SO besteht aus allen Gleichungen des GlS.

Zwischen den allgemeinen Matrizen $\underline{\underline{C}}$ der AG der Matrix $\underline{\underline{T}}_a$ und den zulässigen Permutationsmatrizen, die in der folgenden Tabelle (Tab.3.2.1.) aufgeführt sind, besteht der folgende Zusammenhang :
Es sind alle $c_i = 0$, bis auf die jeweils angegebenen $c_k = 1$;

Operation		Operation		Operation	
E	$c_1=1, c_2=1$	δ_v	$c_3=1, c_5=1$	δ_h	$c_4=1$;
C_2	$c_6=1$	C_4	$c_3=1$	C_4^3	$c_4=1, c_5=1$;
δ_{d_1}	$c_2=1$	δ_{d_2}	$c_1=1, c_6=1$	.	

In der Tabelle 3.2.1. bilden die Elemente mit positiver Determinante die Gruppe D_2 , nämlich die Gruppe der zulässigen SO bei unterschiedlichen Membranen.

Die Elemente C_4 , $C_4^2 = C_2$, C_4^3 , $C_4^4 = E$ stellen die Dre-

hungen um 90° , 180° , 270° und 360° gegen den Uhrzeigersinn um das Symmetriezentrum dar.

Tab. 3.2.1.

Darstellung der Elemente der Gruppe D_4 .

Die Gruppe D_4 besteht aus den folgenden Elementen und läßt sich bezüglich des 4-Kompartementsystems als Trägermenge mit der in Abb.3.2.1. gewählten Indizierung in folgender Weise darstellen :

Bezeichnung	Zyclen-darstellung	Permutations-darstellung	Matrix-darstellung	Determinante der Matrix
E	(1)(2)(3)(4)	$\begin{pmatrix}1&2&3&4\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$	+ 1
δ_v	(12)(34)	$\begin{pmatrix}1&2&3&4\\2&1&4&3\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{pmatrix}$	+ 1
δ_h	(13)(24)	$\begin{pmatrix}1&2&3&4\\3&4&1&2\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&1\\1&0&0&0\\0&1&0&0\end{pmatrix}$	+ 1
C_2	(14)(23)	$\begin{pmatrix}1&2&3&4\\4&3&2&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}$	+ 1
C_4	(1342)	$\begin{pmatrix}1&2&3&4\\3&1&4&2\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1&0&0\\0&0&0&1\\1&0&0&0\\0&0&1&0\end{pmatrix}$	- 1

C_4^3 (1243) $\begin{pmatrix}1&2&3&4\\2&4&1&3\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}0&0&1&0\\1&0&0&0\\0&0&0&1\\0&1&0&0\end{pmatrix}$ - 1

δ_{d_1} (14) $\begin{pmatrix}1&2&3&4\\4&2&3&1\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}$ - 1

δ_{d_2} (23) $\begin{pmatrix}1&2&3&4\\1&3&2&4\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$ - 1 .

δ_v bzw. δ_h sind Drehungen im Raum um die in der vertikalen bzw. horizontalen Membran liegend gedachten Achsen.

δ_{d_1} bzw. δ_{d_2} sind Drehungen im Raum um die diagonalliegenden Achsen, d.h. um die erste bzw. zweite Winkelhalbierende.

Die Zyclen- oder Permutationsdarstellungen einer Operation bedeuten z.B. für C_4, daß die Zelle 1 auf die Position von Zelle 3, die Zelle 3 auf die Position von Zelle 4, die Zelle 4 auf die Position von Zelle 2, die Zelle 2 auf die Position von Zelle 1 abgebildet wird. Die einer Permutationsdarstellung $\begin{pmatrix}1&2&3&4\\\alpha_1&\alpha_2&\alpha_3&\alpha_4\end{pmatrix}$ zuordbare Matrizendarstellung besteht aus Permutationsmatrizen $\underline{\underline{P}}$; bei diesen steht nur am Schnittpunkt von Spalte 1, (i) usw. mit Zeile α_1, (α_i) usw. ein Wert (eins). Diese Matrizen bewirken, daß der Zeilenvektor $\underline{x}^T = (1,2,3,4)$ der Anordnung der Zellen in den Vektor $\underline{x}^{T'} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$ überführt wird: $\underline{x}^T \cdot \underline{\underline{P}} = \underline{x}^{T'}$.

Neben dieser Matrizendarstellung gibt es noch eine zuordbare Matrizendarstellung, deren Matrizen die transponierten Matrizen $\underline{\underline{P}}^T$

der ersteren sind, d.h. die Zeilen der ersten sind zu Spalten der andern geworden. Diese Matrizen wirken auf den Spaltenvektor $\underline{x}$ der Anordnung : $\underline{\underline{P}}^T \cdot \underline{x} = \underline{x}'$.

Die Verknüpfung von zwei Operationen erfolgt für jede in der obigen Tabelle aufgeführten Darstellung so, daß der Operator der zuerst auszuführenden Operation rechts steht. Das bedeutet z.B. aus dem Nacheinanderausführen von zuerst der Drehung δ_v und danach der Drehung C_4 resultiert die Drehung δ_{d2} :

$$C_4 \quad T \quad \delta_v \quad = \quad \delta_{d2} \quad .$$

$$\begin{pmatrix} 1&2&3&4 \\ 3&1&4&2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1&2&3&4 \\ 2&1&4&3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1&2&3&4 \\ 1&3&2&4 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0&1&0&0 \\ 0&0&0&1 \\ 1&0&0&0 \\ 0&0&1&0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0&1&0&0 \\ 1&0&0&0 \\ 0&0&0&1 \\ 0&0&1&0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1&0&0&0 \\ 0&0&1&0 \\ 0&1&0&0 \\ 0&0&0&1 \end{pmatrix} .$$

In der Permutationsdarstellung wird die Zelle 1 durch δ_v in die Position von Zelle 2 und die Zelle 2 durch C_4 in die Position von Zelle 1 abgebildet, so daß unter der Gesamtbewegung die Position von Zelle 1 erhalten bleibt; u.s.w.. In der Matrizendarstellung wird das Matrizenprodukt gebildet. In der Darstellung mit transponierten Matrizen wird durch das Transponieren die Reihenfolge der Faktoren vertauscht.

Es gilt : $(\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{B}})^T = \underline{\underline{B}}^T \cdot \underline{\underline{A}}^T$.

Alle symmetrischen Matrizen gehen beim Transponieren in sich selbst über. Alle orthogonalen Matrizen gehen beim Transponieren in ihre Inversen über. Permutationsmatrizen sind orthogonal. Die Operationen C_4 und C_4^3 sind zueinander invers, alle andern Operationen der Gruppe D_4 sind zu sich selbst invers, ihre Matrizen sind symmetrisch.

Wenn nur die Matrizen und nicht ihre Bedeutung betrachtet wird, ist die Verknüpfung der transponierten Matrizen z.B. $\underline{\underline{\delta}}_v^T \cdot \underline{\underline{C}}_4^T = \underline{\underline{\delta}}_{d2}^T$ nicht von der Verknüpfung der nicht-transponierten Matrizen zu unterscheiden $\underline{\underline{\delta}}_v \cdot \underline{\underline{C}}_4^3 = \underline{\underline{\delta}}_{d2}$. Wenn zwischen der Zeilen- und Spaltendarstellung gewechselt wird, kann Unklarheit entstehen, was zuerst rechts und dannn links bedeutet. Bei der Darstellung mit Spaltenvektoren d.h. bei der Verknüpfung von den transponierten Matrizen steht die Matrix der zuerst auszuführenden Operation links.

Es gilt also für die Operationen und Matrizen :

z.B. $C_4^T \quad \delta_v \mathrel{\hat{=}} \underline{\underline{C}}_4 \cdot \underline{\underline{\delta}}_v \mathrel{\hat{=}} \underline{\underline{\delta}}_v^T \cdot \underline{\underline{C}}_4^T$.

Die Reihenfolge der Operationen ist hier in jedem Fall zuerst δ_v und dann C_4 ; bei der Verknüpfung der Operationen steht die zuerst auszuführende Operation rechts. Werden den Operationen die ersten acht Buchstaben des kleinen lateinischen Alphabets zugeordnet : e $\hat{=}$ E, a $\hat{=}$ δ_v , b $\hat{=}$ δ_h , c $\hat{=}$ C_2 , d $\hat{=}$ C_4^3 , f $\hat{=}$ C_4 , g $\hat{=}$ δ_{d1} , h $\hat{=}$ δ_{d2} , so gilt für die Gruppe D_4 die folgende Multiplikations- (Verknüpfungs-) tabelle:

•	e	a	b	c	f	d	g	h
e	e	a	b	c	f	d	g	h
a	a	e	c	b	g	h	f	d
b	b	c	e	a	h	g	d	f
c	c	b	a	e	d	f	h	g
f	f	h	g	d	c	e	a	b
d	d	g	h	f	e	c	b	a
g	g	d	f	h	b	a	e	c
h	h	f	d	g	a	b	c	e

.

Die Operationen in der obersten Reihe werden zuerst angewandt. Das Viertelquadrat oben links von e bis c entspricht der Verknüpfungstabelle der Gruppe D_2 .

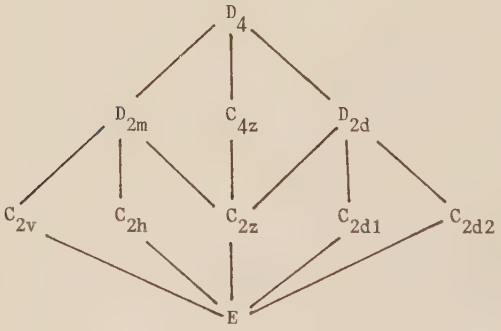
3.2.5. Folgerungen aus der Symmetrie für die Lösungsmenge.

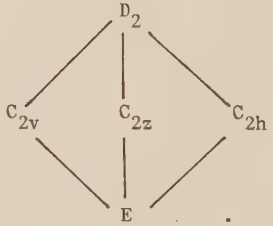
Mit Hilfe der so gewonnenen Gruppen lassen sich einschränkende Aussagen über die Lösungsmenge machen. Dies sind keine Aussagen über konkrete Größen, solche Aussagen lassen sich nur aus der Berechnung des RTS selbst gewinnen, sondern Aussagen über Beziehungen zwischen den Größen (Ordnungsrelationen), Aussagen über die innere Symmetrie. Die für die Lösungen charakteristische Eigenschaft - innere Symmetrie - soll hier Muster der Lösung heißen, dabei können zwei oder mehr Lösungen dasselbe Muster haben.

Es lassen sich also Muster finden, die gegenüber den S-O bestimmter Untergruppen (UG) invariant bleiben und die damit außer Nachbarschaft noch eine weitere innere Struktur besitzen.

Abb. 3.2.2.

Für die Gruppen D_4 bzw. D_2 lassen sich die folgenden UG-Verbände angeben :





Die UG der Ordnung 2 sind alle der C_2 Gruppe isomorph. Sie bestehen aus der Identität und der namensgebenden Operation. So enthält z.B. C_{2z} die Drehung um das Symmetriezentrum (z), und C_{2v} die Drehung σ_v.

Bei den UG der Ordnung 4 enthält die UG D_{2m} dieselben Operatio-

nen, wie die nebenstehende und oben erwähnte D_2 Gruppe, d.h. die Drehungen um die Achsen in den Membranen und die Drehung um das Symmetriezentrum um 180°.

Die UG C_{4z} enthält die Drehungen C_4 , C_2 , C_4^3 und E um das Zentrum. Die UG D_{2d} enthält außer C_2 und E noch die Drehungen um die Winkelhalbierenden, die Diagonalen.

Es sollen den UG Muster von Größensorten zugeordnet werden, ohne daß die Richtung der "größer als" - Relation betrachtet wird; kleine Buchstaben aus dem Anfang des lat. Alphabets sollen für eine Größensorte stehen.

Unter der Wirkung der Gruppe selber ist nur ein Muster invariant, nämlich das völlig symmetrische. Es hat keine "größer als" - Relation nur eine "gleich" - Beziehung, die in jeder Richtung gilt. Dieses Muster ist auch unter allen anderen UG invariant.

Unter D_4 und D_2 ist das Muster

a	a
a	a

invariant. Muster mit weniger Symmetrie werden durch die Wirkung der Gruppe in andere Muster überführt.

Von den UG der Ordnung 4 lassen D_{2m} und C_{4z} nur das schon bekannte Muster (a,a,a,a) invariant.

Die UG D_{2d} läßt noch ein Muster invariant. Die Geraden, die bei einer Drehung um 180° in sich übergehen, stehen orthogonal zur Drehachse damit gilt die "gleich" - Relation orthogonal zur Drehachse. Hier also orthogonal zu den beiden Diagonalen, also in Richtung der Diagonalen selbst. Es kann zwei Sorten von Größen geben und damit eine "größer als" - Relation. Die Ordnung der Standgruppe zu diesem Muster ist 4, die Ordnung der Bahn unter D_4 also 2.

Unter D_{2d} ist das Muster

a	b
b	a

invariant.

Das zugehöhrige äquivalente Muster ist als Muster von Größensorten vom Muster nicht unterscheidbar und unter der selben Standgruppe invariant.

Von den UG der Ordnung 2 läßt C_{2z} nur die schon bekannten Muster invariant. Im Falle der Gruppe D_2 ist aber das Muster (a,b,b,a) noch nicht vorgekommen.

Unter C_{2z} ist das Muster

a	b
b	a

invariant.

Die Ordnung der Bahn zu diesem Muster ist unter D_2 2.

Die UG C_{2v} läßt noch ein Muster invariant. Die "gleich" - Relation steht orthogonal zur Vertikalen, liegt also in horizontaler Richtung, damit kann es zwei Größensorten geben und eine "größer als" - Relation in vertikaler Richtung.

Unter C_{2v} ist das Muster

a	a
b	b

invariant.

Die Ordnung der Bahn zu diesem Muster ist unter D_4 4 (bzw. unter D_2 2). Es gibt noch 3 (bzw. 1) äquivalente Muster, die durch die Wirkung der Elemente der Linksnebenklassen (LNK) bezüglich der Standgruppe C_{2v} aus diesem erzeugbar sind und durch die Wirkung der Elemente der Rechtsnebenklassen (RNK) in dieses überführt werden.

Anmerkung: Die Nebenklasse bezüglich der Untergruppe U zum Element $x \in G$ läßt sich auch wie folgt darstellen

Linksnebenklasse :

$$L_x = x \cdot U = \{xTu \mid \text{für ein } x \in G \text{ und alle } u \in U\}$$

Rechtsnebenklasse :

$$R_x = U \cdot x = \{uTx \mid \text{für ein } x \in G \text{ und alle } u \in U\} .$$

Nach 2.1. und 3.2.4. wird zuerst die rechtsstehende Operation ausgeführt. Die Elemente der LKN lassen sich als Produkte so darstellen, daß immer rechts ein Element der Standgruppe steht; so bleibt das Muster unter der zuerst ausgeführten Operation invariant.

Also überführen alle Elemente einer LNK L_x das Muster in ein und dasselbe äquivalente Muster.

Dazu ein Beispiel : eine Bahn äquivalenter Muster unter D_4 zum Muster (a,a,b,b) des Aggregats aus 4 Zellen mit gleichen Membranen.

a	a
b	b

a	b
a	b

b	b
a	a

b	a
b	a

Die Operationen mit den Elementen der LNK bezüglich C_{2v} in D_4 erzeugen die Muster aus dem Muster (a,a,b,b) :

L_X	C_{2v}	L_{x1}	L_{x2}	L_{x3}
x	E	C_4	C_2	C_4^3
xTu	δ_v	δ_{d2}	δ_h	δ_{d1}

Die Operationen mit den Elementen der RNK bezüglich C_{2v} in D_4 überführen die Muster in das Muster (a,a,b,b) :

R_X	C_{2v}	R_{x1}	R_{x2}	R_{x3}
x	E	C_4^3	C_2	C_4
uTx	δ_v	δ_{d2}	δ_h	δ_{d1}

Der Bahn eines Musters lassen sich auch transitive (oder Bahn-) Gruppen zuordnen. Für das unter C_{2v} invariante Muster sind das hier die Gruppen

$C_{4z} = \{E, C_4, C_2, C_4^3\}$ und $D_{2d} = \{E, \delta_{d1}, C_2, \delta_{d2}\}$.

Die Bahngruppen sind auch wie die Standgruppen Untergruppen der Gruppe der zulässigen SO. Die Standgruppe des jeweiligen Musters ist :

C_{2v} C_{2h} C_{2v} C_{2h}

Sie läßt das zugehöhrige Muster invariant.

Die UG C_{2h} läßt noch das Muster

a	b
a	b

invariant.

Dieses gehöhrt aber unter D_4 schon zu den zu (a,a,b,b) äquivalenten Mustern, nur unter D_2 ist es unabhängig. - In D_4 gehöhren δ_h und δ_v zur selben Klasse konjugierter Elemente.

Die UG C_{2d1} läßt außer den Mustern, die von den sie einschließenden UG mit der Ordnung 4 oder 8 invariant gelassen werden, noch ein Muster invariant. Die "gleich" - Relation steht orthogonal zu d1 also in Richtung der 2. Diagonale und in alle andern Richtungen können sich "größer als" - Relationen erstrecken. So kann es 3 Größensorten geben.

Unter C_{2d1} ist das Muster

a	b
c	a

invariant.

Die Ordnung der Bahn zu diesem Muster ist 4 , für D_2 gibt es diese UG nicht und damit auch nicht dieses Muster. Die äquivalenten Muster sind durch LNK - Elemente erzeugbar. Es sind (a,c,b,a), das als Muster der Größensorten nicht unterscheidbare Muster, und das Paar (b,a,a,c) und (c,a,a,b).

Das durch die UG C_{2d2} noch erzeugbare Muster ist schon durch das zum Muster von C_{2d1} äquivalente Paar gegeben. In D_4 gehöhren δ_{d1} und δ_{d2} zur selben Klasse konjugierter Elemente.

Die UG der Ordnung 1 , nämlich E, läßt außer allen bisherigen Mustern noch das Muster ohne jede "gleich" - Relation mit "größer als" - Relationen in jeder Richtung invariant.

Unter E ist das Muster

a	b
c	d

invariant.

Die Ordnung der Bahn ist unter D_4 8, bzw. unter D_2 4.
Die Nebenklassen nach E werden je durch ein einziges Element gebildet.
Die äquivalenten Muster sind als Muster der Größensorten nicht voneinander unterscheidbar.

Für jede Anordnung von $2n$ Zellen in einem Doppelstrang ist die Gruppe der zulässigen SO die D_2 - Gruppe.

z.B. für :

1	2	...	n
n+1	n+2	...	2n

.

Auch nach Übergang zu verteilten Parametern d.h. zu Diffusion ist die Gruppe der zulässigen SO isomorph zur D_2 - Gruppe. Da sich die Trägermenge durch ihre Ausdehnung oder allein schon durch die Anzahl der Zellen unterscheidet, d.h. die beschreibenden DGlS unterschiedliche Dimensionen haben, sind trotz gleicher Symmetrie-Gruppen weitere Muster zu erwarten.

Tab. 3.2.2.

Zusammenstellung der erzeugbaren Muster der Größensorten in einem System mit 4 Kompartementen. Die Transportkopplungen genügen den Symmetrie - Operationen der Gruppe D_4 bzw. D_2.

Muster der Lösung (M.d.L.)	wirkende UG als Standgruppe	Ordnung der Bahn auf der Menge der M. d. L.	wirkende UG als Standgruppe	Ordnung der Bahn a. d. Menge der M. d. L.
a a / a a	D_4	1	D_2	1
a b / b a	D_{2d}	2	C_{2z}	2
a a / b b	C_{2v}	4	C_{2v}	2
a b / a b	C_{2h}	4	C_{2h}	2
a b / c a	C_{2d1}	4	-	-
b a / a c	C_{2d2}	4	-	-
a b / c d	E	8	E	4

3.2.6. Die Transformation zur Vereinfachung des Gleichungssystems.

Jeder lineare Operator auf einer Trägermenge mit der Symmetrie einer Grupppe läßt sich durch eine bestimmte unitäre Transformation vereinfachen. Auch für den nicht-linearen Operator, der im RTS wirkt, werden gewisse Vereinfachungen durch diese unitäre Transformation erreicht. Die Matrix der unitären Transformation läßt sich mit Hilfe von Projektionsoperatoren gewinnen.

Für die Gruppe D_2 lassen sich die Eigenoperatoren $\underline{\underline{\varepsilon}}^{(i)}$ gewinnen :

$$\begin{aligned}
\underline{\underline{\varepsilon}}^{(1)} &= \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{C}}_2 + \underline{\underline{\delta}}_v + \underline{\underline{\delta}}_h \\
\underline{\underline{\varepsilon}}^{(2)} &= \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{C}}_2 - \underline{\underline{\delta}}_v - \underline{\underline{\delta}}_h \\
\underline{\underline{\varepsilon}}^{(3)} &= \underline{\underline{E}} - \underline{\underline{C}}_2 + \underline{\underline{\delta}}_v - \underline{\underline{\delta}}_h \\
\underline{\underline{\varepsilon}}^{(4)} &= \underline{\underline{E}} - \underline{\underline{C}}_2 - \underline{\underline{\delta}}_v + \underline{\underline{\delta}}_h
\end{aligned} \qquad (6).$$

Damit gilt für den 4-dimensionalen (4 Zellen) Vektorraum :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{\varepsilon}}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{\varepsilon}}^{(4)} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \qquad (7).$$

Jeder Eigenoperator enthält nur einen linear unabhängigen Spalten-Vektor. Diese Vektoren bilden eine symmetrie - angepaßte Basis; sie sind orthogonal zueinander, aber noch nicht normiert. Der Normierungsfaktor (s.o. 2.2.2.) ist $1/2 = \sqrt{1/4}$, so daß die gesuchte unitäre Transformation durch die Matrix $\underline{\underline{A}}$ dargestellt wird :

$$\underline{\underline{A}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \qquad (8).$$

Die Reihenfolge der Vektoren (Spalten der Matrix $\underline{\underline{A}}$) wurde so gewählt, daß die Matrix symmetrisch ist.

Diese Matrix ist auch bei Symmetrie der Gruppe D_4 brauchbar und kann ähnlich gewonnen werden.

3.2.7. Das Reaktions - Transport - System in symmetrie - angepaßten Koordinaten.

An Stelle der Darstellung des RTS durch eine Operatoren - Gleichung (wie in 3.2.3. mit $\mathfrak{D}(\underline{x}) = \mathcal{F} + \mathcal{R}(\underline{x}) + \mathcal{T}(\underline{x})$) läßt sich das System auch komponentenweise darstellen; hierbei bezieht sich die Darstellung auf ein gegebenes Koordinatensystem.

Für die beiden Substanzen ξ und η gelten in jedem Kompartement i die beiden folgenden gewöhnlichen DGl :

$$\dot{\xi}_i = \varphi + \chi - \xi_i - \rho_i(\xi_i, \eta_i) - P_{vx}(\xi_i - \xi_j) - P_{hx}(\xi_i - \xi_k),$$
$$\dot{\eta}_i = \alpha(\varphi - \rho_i(\xi_i, \eta_i)) - P_{vy}(\eta_i - \eta_j) - P_{hy}(\eta_i - \eta_k) \qquad (9).$$

j meint das rechte oder linke Nachbarkompartement, d.h. Nachbarn jenseits der vertikal-liegenden Membran.

k meint das obere oder untere Nachbarkompartement, d.h. Nachbarn jenseits der horizontal-liegenden Membran.

ρ_i der Reaktionsterm ist die nicht-lineare Funktion der Konzentration der beiden Substanzen in der Zelle i, $\rho_i(\xi_i, \eta_i)$:

$$\rho_i = \gamma\varphi \frac{\xi_i \cdot \eta_i}{1 + \xi_i + \delta\xi_i^2 + \eta_i} \qquad (10).$$

Alle Größen, Parameter und Variablen sind von hier ab dimensionslos. Auf die Markierung mit * bei den Permeationskonstanten kann aus schreibtechnischen Gründen ohne Verwechslungsgefahr verzichtet werden.

Das RTS läßt sich vorteilhaft im Koordinaten-System mit symmetrie-angepaßter Basis darstellen. Dazu wird im ersten Schritt die Transformation des Variablenvektors ausgeführt. Diese Transformation läßt sich für jede Substanz (jeden Sustanzvektor) gesondert ausführen. Die Konzentrationen z.B. der Substanz η in den einzelnen Kompartementen stellen eine Darstellung bezüglich der "natürlichen" Basis dar. So daß sich der Vektor mit den Komponenten η_i bilden läßt :

$$\underline{\eta}^T = (\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4) \qquad (11.a).$$

Die in 3.2.6. bestimmte Matrix $\underline{A}$ transformiert die Komponenten des Vektors $\underline{\eta}$ in Komponenten des Vektors $\underline{y}$, des Vektors der Substanzkonzentrationen bezüglich der symmetrie-angepaßten Basis. Seine Darstellung in Komponenten ist :

$$\underline{y}^T = (y_s, y_h, y_v, y_d) \qquad (11.b).$$

Da die unitäre Transformations-Matrix symmetrisch und reell ist, vermittelt sie auch die Rücktransformation, d.h. sie ist mit ihrer Inversen identisch. Es gilt also :

$$\underline{y} = \underline{A} \cdot \underline{\eta}, \quad \underline{\eta} = \underline{A} \cdot \underline{y} \qquad (11.c)$$

Die neuen Variablen, d.h. die Komponenten des Vektors $\underline{y}$ sind Funktionen der alten Variablen. Dabei haben die Indizes folgende Bedeutung :

s Die Variable ist proportional zur Summe über alle Kompartemente.

h Die Variable ist proportional zur Differenz der Summen über die horizontal nebeneinander liegenden Kompartemente.

v Die Variable ist proportional zur Differenz der Summen über die vertikal nebeneinander liegenden Kompartemente.

d Die Variable ist proportional zur Differenz der Summen über die diagonal liegenden Kompartemente.

Für den Vektor der anderen Substanz ξ gelten die selben Transformationen.

Es gilt für die natürliche Basis : $\xi^T = (\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4)$,

und für die symmetrie-angepaßte Basis : $\underline{x}^T = (x_s, x_h, x_v, x_d)$,

sowie für die Transformationen : $\underline{x} = \underline{\underline{A}}\,\xi$, $\xi = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{x}$ (12).

Aus den nicht-linearen Reaktionstermen ρ_i läßt sich ein Reaktionsvektor bilden, dieser läßt sich bezüglich der natürlichen Basis darstellen als : $\rho^T = (\rho_1, \rho_2, \rho_3, \rho_4)$ (13.a),

bezüglich der symmetrieangepaßten Basis läßt sich eine Darstellung postulieren : $\underline{r}^T = (r_s, r_h, r_v, r_d)$ (13.b)

Zwischen beiden Darstellungen vermittelt auch hier die Transformationsmatrix $\underline{\underline{A}}$: $\underline{r} = \underline{\underline{A}} \cdot \rho$, $\rho = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{r}$ (13.c)

Die Beziehungen zwischen den Komponenten der Substanzvektoren und den des Reaktionsvektors sind in der symmetrieangepaßten Basis sehr kompliziert, so daß der symmetrieangepaßte Reaktionsvektor vor allem eine formale abkürzende Schreibweise ist.

Um zu dem Differentialgleichungssystem in der neuen Basis zu gelangen, muß die Transformation auch auf die Differentialvektoren angewandt werden. Für beide Substanzen lautet das DGlS nach der Transformation :

$$
\begin{aligned}
\dot{x}_s &= 2(\varphi + \chi) - x_s - r_s, \\
\dot{x}_j &= -(1 + 2P_{jx})\,x_j - r_j, \\
\dot{x}_d &= -(1 + 2(P_{hx} + P_{vx}))\,x_d - r_d, \\
\dot{y}_s &= \alpha\,(2\varphi - r_s), \\
\dot{y}_j &= -2P_{jy} \cdot y_j - \alpha\, r_j, \\
\dot{y}_d &= -2(P_{hy} + P_{vy})\,y_d - \alpha\, r_d, \text{ mit } j \in \{h, v\}
\end{aligned}
\qquad (14).
$$

Dieses GlS enthält für jede Substanz eine Gleichung ohne Transport und je ein Paar mit nur einem Transportparameter. Für die beiden restlichen Glei-

chungen lassen sich Summen-Transportparameter bilden :

$$P_{dx} = P_{hx} + P_{vx}, \quad P_{dy} = P_{hy} + P_{vy}$$

Damit hat das GlS die folgende Gestalt :

$$\begin{aligned}
\dot{x}_s &= 2(\varphi + \chi) - x_s - r_s, \\
\dot{y}_s &= \alpha(2\varphi - r_s), \\
\dot{x}_j &= -(1+2P_{jx})\,x_j - r_j, \\
\dot{y}_j &= -2P_{jy}\cdot y_j - \alpha\cdot r_j, \quad j \in \{h, v, d\} \qquad (3.2.15).
\end{aligned}$$

3.3. Der stationäre Zustand.

Wichtige Aussagen über die Eigenschaften eines Systems lassen sich durch die Untersuchung der stationären Lösungen gewinnen. Stationäre (steady state) Lösungen sind solche Lösungen, deren zeitliche Veränderung verschwindet. Das GlS der stationären Lösungen ist kein DGlS, sondern wegen der verschwindenden linken Seite ein algebraisches Gleichungssystem.

3.3.1. Reduktion der Dimension des Variablenraums unter steady state Bedingungen von 8 auf 4 .

Aus den beiden ersten Gleichungen (3.2.15) ergibt sich hier unmittelbar eine Lösung : $r_s = 2\varphi, \quad x_s = 2\chi$ (3.3.1.).

Da r_s als nicht-linearer Ausdruck eine komplizierte Funktion der Substanzen x und y ist, kann die Berechnung von y_s nicht direkt erfolgen. Zur Untersuchung der restlichen Gleichungen ist es praktisch, die Parameter weiter zusammenzufassen. Mit: $\beta_j = -2P_{jy}/\alpha$ und $\delta_j = -\beta_j/(1+2P_{jx})$ folgt : $r_j = \beta_j \cdot y_j$ und $x_j = \delta_j \cdot y_j$ für $j \in \{h, v, d\}$ (3.3.2.). Unter steady state (st.-st.) Bedingungen sind also x_j und y_j direkt proportional.

Zur weiteren Untersuchung reicht also die Untersuchung der 4

Komponenten des $\underline{y}$ - Vektors, d.h. unter st.-st.-Bedingungen wird das GlS vom 8-dimensionalen Variablenraum auf einen 4-dimensionalen Raum reduziert.

Der Zusammenhang zwischen den Komponenten des Variablenvektors $\underline{y}$ und den Komponenten des nicht-linearen Vektors $\underline{r}$ ist im Koordinaten-System der symmetrieangepaßten Basis unübersichtlich, außer der bestehenden Proportionalität; so daß diese Untersuchungen im natürlichen Koordinaten-System erfolgen sollen bei Berücksichtigung der hier gewonnen Zusammenhänge. Die Abhängigkeit der Vektoren $\underline{r}$ und $\underline{x}$ von $\underline{y}$ kann durch die Vektoren $\underline{B}^*$ und $\underline{D}^*$ ausgedrückt werden, mit: $\underline{r} = \underline{B}^*(\underline{y})$, $\underline{x} = \underline{D}^*(\underline{y})$,

$\underline{B}^{*T}(\underline{y}) = (2\varphi, \beta_h y_h, \beta_v y_v, \beta_d y_d)$, $\underline{D}^{*T} = (2\chi, \delta_h y_h, \delta_v y_v, \delta_d y_d)$ (3.).

Die Beziehung zwischen dem ursprünglichen 8-dimensionalen und dem neuen 4-dimensionalen System lautet dann :

$$\underline{\varrho} = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{B}^*(\underline{y}), \quad \underline{\xi} = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{D}^*(\underline{y}), \quad \underline{\eta} = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{y} \quad (4.).$$

3.3.2. Formale Zerlegung des Variablenvektors und Übergang zu einem formal 3-dimensionalen System.

Rein formal läßt sich auch für die Summenkomponente y_s eine eine neue Größe einführen : $\Psi = y_s/2$, die den Zuflußparametern φ und χ entspricht, von denen die symmetrischen Größen x_s und r_s allein abhängig sind. So läßt sich der Vektor $\underline{y}$ durch einen Vektor $\underline{F}^*(\underline{y})$ ersetzen mit : $\underline{F}^{*T}(\underline{y}) = (2\Psi, y_h, y_v, y_d)$ (3.3.5.).

Damit können die Vektoren $\underline{B}^*$, $\underline{D}^*$ und $\underline{F}^*$ in einen symmetrischen und einen nicht-symmetrischen Anteil zerlegt werden :

$$B^{*T}(\underline{y}) = (2\varphi, \underline{B}^T) \; ; \; D^{*T}(\underline{y}) = (2\chi, \underline{D}^T) \; ; \; \underline{F}^{*T}(\underline{y}) = (2\Psi, \underline{F}^T) \; ;$$

$$\text{mit } \underline{B}^T = (\beta_h y_h, \beta_v y_v, \beta_d y_d),$$

$$\underline{D}^T = (\delta_h y_h, \delta_v y_v, \delta_d y_d),$$

$$\underline{F}^T = (y_h, y_v, y_d) \qquad (3.3.6.).$$

Diese Zerlegung ermöglicht eine Zerlegung der Transformationsmatrix, so daß die Transformation hauptsächlich als von einer 4 x 3 Rechtecksmatrix $\underline{\underline{A}}^{*}$ ausgeführt gedacht wird.

$$\underline{\underline{A}}^{*} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Es gilt: $\underline{\varrho} = 2\,\underline{A}_S^{*}\,\varphi + \underline{\underline{A}}^{*} \cdot \underline{B}$, $\underline{\xi} = 2\,\underline{A}_S^{*} \cdot \chi + \underline{\underline{A}}^{*} \cdot \underline{D}$ und $\underline{\eta} = 2\,\underline{A}_S^{*} \cdot \psi + \underline{\underline{A}}^{*} \cdot \underline{F}$,
mit $\underline{A}_S^{*T} = (1/2) \cdot (1,1,1,1)$ (3.3.7.).

Diese Zerlegung läßt sich auch folgendermaßen interpretieren:
Die Komponenten der Variablen-Vektoren bezüglich der natürlichen Basis ($\underline{\varrho}$, ξ sowie $\underline{\eta}$) lassen sich in einen symmetrischen Anteil und die Abweichung davon in den einzelnen Kompartementen zerlegen, d. h. an Stelle von $\underline{\underline{A}}^{*}\,\underline{F}$ wird der Vektor der Abweichung $\underline{u}^{*}$ eingeführt. Da die Summe über alle Komponenten des Vektors der Abweichung $\underline{u}^{*}$ gleich o ergibt, besteht $\underline{u}^{*}$ nur aus drei linear unabhängigen Komponenten, d. h. dieser Vektor ist wie der Vektor $\underline{F}$ dreidimensional.
Mit $\underline{u}^{T} = (u_1 , u_2 , u_3)$ und der Transformationsmatrix $\underline{\underline{A}}^{**}$

$$\underline{\underline{A}}^{**} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \qquad \underline{\underline{A}}^{**-1} = \begin{pmatrix} o & -1 & -1 \\ -1 & o & -1 \\ -1 & -1 & o \end{pmatrix}$$

und ihrer Inversen $\underline{\underline{A}}^{**-1}$ ergeben sich zwischen $\underline{F}$ und $\underline{u}$ die folgenden Transformationen: $\underline{u} = \underline{\underline{A}}^{**} \cdot \underline{F}$; $\underline{F} = \underline{\underline{A}}^{**-1} \cdot \underline{u}$ (3.3.8.).
Die Matrizen $\underline{\underline{A}}^{*}$ und $\underline{\underline{A}}^{**}$ sind Teilmatrizen der Matrix $\underline{\underline{A}}$.

Die Variablenvektoren erhalten die folgende Gestalt:

$$\underline{\eta} = 2\underline{A}_S^{*} \cdot \Psi + \underline{\underline{A}}^{*} \cdot \underline{\underline{A}}^{**-1} \cdot \underline{u}\,,$$
$$\underline{\xi} = 2\underline{A}_S^{*} \cdot \chi + \underline{\underline{A}}^{*} \cdot \underline{\delta} \cdot \underline{\underline{A}}^{**-1} \cdot \underline{u}\,,$$
$$\underline{\varrho} = 2\underline{A}_S^{*} \cdot \varphi + \underline{\underline{A}}^{*} \cdot \underline{\beta}\,\underline{\underline{A}}^{**-1} \cdot \underline{u}\,, \qquad (9).$$

mit den 3 x 3 Diagonalmatrizen:

$$\underline{\underline{\delta}} = \begin{pmatrix} \delta_h & 0 & 0 \\ 0 & \delta_v & 0 \\ 0 & 0 & \delta_d \end{pmatrix}, \qquad \underline{\underline{\beta}} = \begin{pmatrix} \beta_h & 0 & 0 \\ 0 & \beta_v & 0 \\ 0 & 0 & \beta_d \end{pmatrix}$$

Der Vektor der Unbekannten ist hier $\underline{v}^T = (2\Psi, \underline{u}^T)$, d.h. Ψ ist die 4. Unbekannte, die den Flußparametern φ und χ nur formal entspricht. Der Vektor $\underline{v}$ bezieht sich auf eine gemischte Basis, die zum Teil aus der symmetrieangepaßten Basis (Ψ Komponente) und zum Teil aus Funktionen der natürlichen Basis (Komponenten des Vektors $\underline{u}$) besteht. Die Zerlegung sieht in Komponentenschreibweise folgendermaßen aus:

$$\eta_i = \Psi + f_i(\underline{u}), \quad \xi_i = \chi + d_i(\underline{u}), \quad \varphi_i = \varphi + b_i(\underline{u}) \qquad (10.)$$

Die Funktionen f_i, d_i und b_i sind die Abweichungen der jeweiligen Größe von der Komponentensumme. Sie können auf jedes Koordinatensystem bezogen werden. Hier sind sie auf das Koordinatensystem der Abweichung der Substanz y bezogen, d. h. als Funktionen des Vektors $\underline{u}$ bestimmt. Der Vektor der Abweichung $\underline{f}$ stimmt mit dem Vektor $\underline{u}^*$ überein.

3.3.3. Die Bedeutung des nicht-linearen Reaktionsterms ρ für die steady state Lösungen.

Durch Einsetzen der in 3.3.2. gewonnen Ausdrücke für die Zerlegung der Komponenten der Variablenvektoren in die Definitionsgleichung des nicht-linearen Reaktionsterms läßt sich ein algebraisches GlS für die st.-st. Lösungen gewinnen. Aus (3.1.10) $\varrho_i = \gamma\varphi \dfrac{\eta_i \xi_i}{1 + \xi_i + \varkappa \xi_i^2 + \eta_i}$

folgt: $$(\varphi + b_i) = \gamma\varphi \frac{(\Psi + f_i)(\chi + d_i)}{1 + (\chi + d_i) + \varkappa(\chi + d_i)^2 + (\Psi + f_i)} \qquad (3.3.11.).$$

Unter der Bedingung, daß das Nennerpolynom nicht verschwindet, können beide Seiten mit dem Nenner ausmultipliziert werden. Das GlS lautet dann:

$$(\varphi + b_i)(1 + \chi + \varkappa\chi^2 + (1 + 2\varkappa\chi) d_i + \varkappa d_i^2 + \Psi + f_i) = \gamma\varphi(\Psi + f_i)(\chi + d_i)$$
$$\text{für } i \in \{1,2,3,4\} \qquad (3.3.12.).$$

Die Parameterausdrücke $1 + \chi + \delta\chi^2$ bzw. $1 + 2\delta\chi$ werden zu q bzw. s zusammengefaßt:

$$(\varphi + b_i)(q + s d_i + \delta d_i^2) + (\psi + f_i)(\varphi + b_i - \gamma\varphi(\chi + d_i)) = 0.$$

Außerdem wird noch $\varphi(\gamma\chi - 1)$ zu t zusammengefaßt:

$$(\varphi + b_i)(q + s d_i + \delta d_i^2) + (\psi + f_i)(b_i - \gamma\varphi d_i - t) = 0 \qquad (3.3.13.).$$

D. h. es ergibt sich ein GlS aus 4 Multinomen, die 3. Grades in $\underline{u}$ und 1. Grades in ψ sind.

3.4. Lösungen des Gleichungssystems mit innerer Symmetrie.

Unter Symmetriebedingungen läßt sich die Dimension des Variablenraums weiter reduzieren und so lassen sich aus dem GlS von 3.3.3. einige Lösungen direkt gewinnen.

3.4.1. Der vollsymmetrische Fall.

Wenn die Abweichungen $\underline{u}$ von der Summenkomponente ψ verschwinden, liegt der vollsymmetrische Fall vor. In diesem Fall verschwinden alle b_i, d_i und f_i und damit alle nicht-linearen Terme. Das GlS entartet zu einer einzigen Gleichung mit einer Unbekannte ψ und die Lösung ist:

$$\psi = \varphi q / t \qquad (3.4.1.).$$

D. h. die Lösung stimmt mit der Lösung des Systems ohne Transport überein.

3.4.2. Die Fälle mit einfacher innerer Symmetrie.

Bei innerer Symmetrie mit einer Standgruppe höherer Ordnung, so daß je zwei Kompartemente paarweise aufeinander abgebildet werden, wird die Dimension des Variablenraums von 4 auf 2 reduziert. Die Summenvariable heiße weiterhin ψ, die andere Komponente wird jetzt mit w bezeichnet. Die Berechnung erstreckt sich über drei Koordinatensysteme mit den Darstellungen $\underline{\eta}$, $\underline{y}$ und $\underline{u}$.

Es gibt drei Unterfälle:

1. Nur eine Differenz zwischen oben und unten.

$$\eta_1 = \eta_2 = \eta_o \; ; \; \eta_3 = \eta_4 = \eta_u \; ;$$

$$y_s = \eta_o + \eta_u \; ; \; y_h = \eta_o - \eta_u \; ; \; y_v = y_d = 0 \; ; \; \underline{y}^T = (2,0,0)\, w \; ;$$

$$\Psi = \tfrac{1}{2}(\eta_o + \eta_u) \; ; \; u_1 = \tfrac{1}{2}(\eta_o - \eta_u) = w \; ; \; u_2 = u_3 = -\tfrac{1}{2}(\eta_o - \eta_u) = -w \; ;$$

$$\underline{u}^T = (1,-1,-1)\, w \qquad (3.4.2).$$

2. Nur eine Differenz zwischen links und rechts.

$$\eta_1 = \eta_3 = \eta_\ell \; ; \; \eta_2 = \eta_4 = \eta_r$$

$$y_s = \eta_\ell + \eta_r \; ; \; y_v = \eta_\ell - \eta_r \; ; \; y_h = y_d = 0 \; ; \; \underline{y}^T = (0,2,0)\, w \; ;$$

$$\Psi = \tfrac{1}{2}(\eta_\ell + \eta_r) \; ; \; u_2 = \tfrac{1}{2}(\eta_\ell - \eta_r) = w \; ; \; u_1 = u_3 = -\tfrac{1}{2}(\eta_\ell - \eta_r) = -w \; ;$$

$$\underline{u}^T = (-1,1,-1)\, w \qquad (3.4.3).$$

3. Alle Komponenten auf jeder Winkelhalbierenden sind gleich. Die Winkelhalbierenden werden mit d_1 bzw. d_2 bezeichnet.

$$\eta_1 = \eta_4 = \eta_{d2} \; ; \; \eta_3 = \eta_2 = \eta_{d1}$$

$$y_s = \eta_{d2} + \eta_{d1} \; ; \; y_d = \eta_{d2} - \eta_{d1} \; ; \; y_h = y_v = 0 \; ; \; \underline{y}^T = (0,0,2)\, w \; ;$$

$$\Psi = \tfrac{1}{2}(\eta_{d2} + \eta_{d1}) \; ; \; u_3 = \tfrac{1}{2}(\eta_{d2} - \eta_{d1}) = w \; ; \; u_1 = u_2 = -\tfrac{1}{2}(\eta_{d2} - \eta_{d1}) = -w \; ;$$

$$\underline{u}^T = (-1,-1,1)\, w \qquad (3.4.4).$$

Die drei Unterfälle lassen sich gemeinsam weiter untersuchen. Im $\underline{u}$ - Koordinatensystem sind die verschiedenen Vorzeichenmuster für die einzelnen Unterfälle von Bedeutung. Im $\underline{y}$ - Koordinatensystem ist nur jeweils eine Komponente von o verschieden, diese bestimmt den Typ j des Unterfalls, $j \in \{h, v, d\}$.

Die Vektoren der Abweichung haben für den jeweiligen Typ j eine recht einfache Gestalt: $\underline{d} = \underline{A}_j^* \cdot \delta_j w$; $\underline{b} = \underline{A}_j^* \cdot \beta_j w$; $\underline{f} = \underline{A}_j^* \cdot w$ (3.4.5.)

Wobei die Vektoren $\underline{A}_j^*$ die Spaltenvektoren der Matrix A^* sind:

$\underline{A}_h^{*T} = (1,1,-1,-1)$, $\underline{A}_v^{*T} = (1,-1,1,-1)$, $\underline{A}_d^{*T} = (1,-1,-1,1)$.

D. h. entsprechend dem $\underline{\eta}$ - Koordinatensystem sind je zwei Komponenten von z.B. $\underline{d}$ unter sich gleich und die andern Komponenten unterscheiden

sich von ihnen nur durch das negative Vorzeichen.

Für den jeweiligen Typ j gelten damit die folgenden Gleichungen:

$$(\Psi+\beta_j\omega)(q+s\delta_j\omega+\varkappa\delta_j^2\omega^2)+(\Psi+\omega)((\beta_j-\gamma\varphi\delta_j)\omega-t)=0$$
$$(\Psi-\beta_j\omega)(q-s\delta_j\omega+\varkappa\delta_j^2\omega^2)+(\Psi-\omega)((\gamma\varphi\delta_j-\beta_j)\omega-t)=0 \qquad (3.4.6.).$$

Der Parameterausdruck $\beta_j-\gamma\varphi\delta_j$ wird zu ε_j zusammengefaßt. Beide Gleichungen werden ausmultipliziert und nach steigender Potenz von w angeordnet. Der Index j kann zur Vereinfachung der Schreibarbeit fortfallen.

$$\varphi q-t\Psi+(\beta q+\delta\varphi s-t+\varepsilon\Psi)\omega+(\varkappa\delta^2\varphi+\beta\delta s+\varepsilon)\omega^2+\varkappa\beta\delta^2\omega^3=0$$
$$\varphi q-t\Psi-(\beta q+\delta\varphi s-t+\varepsilon\Psi)\omega+(\varkappa\delta^2\varphi+\beta\delta s+\varepsilon)\omega^2-\varkappa\beta\delta^2\omega^3=0 \qquad (3.4.7.).$$

Nur für die ungeraden Potenzen von w unterscheiden sich die Koeffizienten, nämlich durch das Vorzeichen. Durch die Transformation mit einer regulären Matrix z.B. $\underline{\underline{T}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}$ läßt sich das GlS in ein äquivalentes einfacheres GlS transformieren:

$$\varphi q - t\Psi + a\,w^2 = o\ ;\ (b+\varepsilon\Psi)\,w + c\,w^3 = o \qquad (3.4.8.);$$

a, b, c sind zusammengefaßte Parameterausdrücke. Die erste Gleichung läßt sich nach Ψ auflösen und dadurch Ψ als Funktion von w darstellen: $\Psi = (\varphi q+(\varkappa\delta_j^2\varphi+\beta_j\delta_j s+\varepsilon_j)\omega^2)/t \qquad (3.4.9.).$

Die zweite Gleichung hat eine Lösung für w = o; damit ist der vollsymmetrische Fall hier eingebettet: $w = o,\ \Psi = \varphi\, q/t$.

Für den Fall $w \neq o$ läßt sich w aus der zweiten Gleichung ausklammern, nach Einsetzen von Ψ aus der ersten Gleichung entsteht eine Gleichung mit einer Unbekannten: $b\,t+\varepsilon\varphi\,q+(\varepsilon\,a+c\,t)\,w^2 = o \qquad (3.4.10.)$

$$\omega^2 = \frac{t(t-\beta_j q)-\varphi(\delta_j s t+\varepsilon_j q)}{\varkappa\delta_j^2(\varphi\varepsilon_j+\beta_j t)+\varepsilon_j(\varepsilon_j+\beta_j\delta_j s)} \qquad (3.4.11.).$$

4. Eine explizite Berechnung für das Muster (a,b,c,a) mit C_{2d1} als Standgruppe wird hier nicht ausgeführt.

a	b
c	a

3.5. Untersuchung des allgemeinen Falls.

3.5.1. Reduktion des allgemeinen Falls auf ein 3-dimensionales GlS.

Da auch Ψ eine unabhängige Variable ist, ist das GlS wie es in (3.3.13.) vorliegt, 4-dim. : $i \in \{1,2,3,4\}$, f_i steht für $f_i(\underline{u})$

$$(\varphi + b_i)(q + sd_i + \gamma d_i^2) + (\psi + f_i)(b_i - \gamma\varphi d_i - t) = 0$$

Der Parameterausdruck $\gamma\varphi d_i - b_i$ läßt sich - ähnlich wie bei den Fällen mit innerer Symmetrie - zu e_i zusammenfassen:

$$(\psi + f_i)(e_i + t) - (\varphi + b_i)(q + sd_i + \gamma d_i^2) = 0 \qquad (3.5.1.).$$

Ausmultipliziert und nach steigenden Potenzen von $\underline{u}$ geordnet folgt:

$$t\psi - \varphi q + \psi e_i + tf_i - \varphi s d_i - q b_i + f_i e_i - s b_i d_i - \gamma\varphi d_i^2 - \gamma b_i d_i^2 = 0$$

(3.5.2.).

In diesem Gleichungssystem tritt Ψ in jeder Gleichung in 2 Termen auf, nämlich in einem von $\underline{u}$ freien und einem mit $\underline{u}$ in erster Potenz. Die Summe über alle diese Gleichungen führt zu einer Gleichung in der Ψ nur noch in einem von $\underline{u}$ freien Term vorkommt. Ein äqivalentes GlS, das eine solche Gleichung enthält, läßt sich durch Transformation mit der Matrix $\underline{\underline{A}}$ Gl (3.2.8.) gewinnen. In der ersten Gleichung, des so transformierten Systems, verschwinden alle Terme, die linear von $\underline{u}$ abhängig sind, denn die Summe der Abweichungen von der Summenkomponente aller Kompartemente verschwindet: $\sum_{i=1}^{4} f_i = \sum b_i = \sum d_i = \sum e_i = 0$.

Die Zeilenvektoren der Matrix $\underline{\underline{A}}^*$ aus Gl (3.3.7.) repräsentieren die Komponenten jedes Vektors der Abweichung, d. h. die von $\underline{u}$ linear abhängigen Terme; und die Komponenten des Vektors $\underline{A}_a^{*T} = (1/2)\ (1,1,1,1)$ repräsentieren die von $\underline{u}$ unabhängigen Terme im GlS vor der Transformation

mit der Matrix $\underline{A}$. Im GlS nach der Transformation gilt dann:

$$\underline{A}_a = \underline{\underline{A}}\,\underline{A}_a^{*} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{A}}_1 = \underline{\underline{A}}\,\underline{\underline{A}}_1^{*} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad (3.5.3.),$$

d. h. die von $\underline{u}$ linear abhängigen Terme verschwinden in der ersten Gl, und in den drei andern Gleichungen gehen die von $\underline{u}$ unabhängigen Terme verloren. Die erste Gleichung hat danach die Gestalt:

$$2t\Psi - 2\varphi q + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{\Psi}\left(f_i e_i - s b_i d_i - \delta\varphi d_i^2\right) - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{\Psi}\delta\varphi b_i d_i^2 = 0 \qquad (3.5.4.).$$

Wenn das restliche 3-dim. GlS für den Vektor der Unbekannten z. B. $\underline{u}$ lösbar ist, lassen sich die Ψ Werte bestimmen.
Aus den Symmetriebetrachtungen sind schon die von $\underline{u}$ freien und die in $\underline{u}$ quadratischen Terme bekannt.

3.5.2. Gruppentheoretische Überlegungen beim Umgang mit Nichtlinearitäten.

Im vorliegenden 4-dim. GlS treten Nicht-linearitäten auf. Sie sind die Produkte der Komponenten der Vektoren der Abweichung von den jeweiligen Summenkomponenten über alle Kompartemente. Diese 4-komponentigen Vektoren sind mit dem 3-dim. Vektor $\underline{F}$ verknüpft:

z. B. $\underline{d} = \underline{\underline{A}}^{*} \cdot \underline{\underline{\delta}} \cdot \underline{F} = \underline{\underline{A}}^{*} \cdot \underline{D}$.

Zur Untersuchung der Nichtlinearitäten sind die Verknüpfungseigenschaften der Matrix $\underline{\underline{A}}^{*}$ mit sich selber von besonderer Bedeutung, $\underline{\underline{A}}^{*}$ enthält die in Frage stehenden Vorzeichenverteilungen.

Die Spaltenvektoren der Matrix $\underline{\underline{A}}^{*}$ repräsentieren die Komponenten des Koordinatensystems $\underline{F}$ in der Basis des Koordinatensystems $\underline{\eta}$. Hier werden die Komponenten des Vektors $\underline{F}$ statt mit h,v,d mit 1,2,3

indiziert und die Spaltenvektoren von $\underline{\underline{A}}^*$ mit $\underline{A}_1^{*T} = (1,1,-1,-1)$, $\underline{A}_2^{*T} = (1,-1,1,-1)$, $\underline{A}_3^{*T} = (1,-1,-1,1)$ bezeichnet; es läßt sich die Zuordnung y_j nach $\underline{A}_j^*$, $j \in \{1,2,3\}$ bilden. Die 4. Komponente des Vektors $\underline{F}^*$, y_s wird mit y_o bezeichnet und dem 1. Spaltenvektor der Matrix $\underline{\underline{A}}$, $\underline{A}_o^{*T} = (1,1,1,1)$ zugeordnet.

Für die Repräsentanten $\underline{A}_j^*$ läßt sich eine Produktbildung entsprechend der bei den Nichtlinearitäten des Gleichungssystems so definieren, daß jeweils das Produkt der i-ten Komponenten dieser Vektoren die i-te Komponente des Produktvektors bildet. In Bezug auf diese Verknüpfung bilden die $\underline{A}_j^*$ eine Gruppe, d.h. in Bezug auf die Vorzeichenverteilung können auch bei den nichtlinearen Termen nur die vier Möglichkeiten $\underline{A}_j^*$ vorkommen. Diese Gruppe ist zur D_2 -Gruppe isomorph.

3.5.3. Bestimmung der Vorzeichenmatrizen für die Nichtlinearitäten 2. und 3. Grades.

Die Vektoren der Nichtlinearitäten lassen sich durch die in 3.5.2. beschriebene besondere Produktbildung aus den linear von $\underline{F}$ abhängigen Vektoren der Abweichung bilden. Solche Vektoren der Abweichung seien: $\underline{k} = \underline{\underline{A}}^* \cdot \underline{N}$ und $\underline{l} = \underline{\underline{A}}^* \cdot \underline{O}$, wobei $\underline{N}$ und $\underline{O}$ drei komponentige Vektoren sind, deren Komponenten sind Funktionen des Vektors $\underline{F}$. Dem Produkt $N_j \cdot O_h$ wird das geordnete Paar (j,h) zugeordnet: j, h $\in \{1,2,3\}$. Die neun Variationen j h werden in lexikographischer Reihenfolge den Spalten einer zu bildenden Matrix zugeordnet, den Zeilen der Matrix wird der Index $i \in \{1,2,3,4\}$ zugeordnet, der die jeweilige Gleichung bezeichnet.

Da die Gruppe D_2 kommutativ ist und jedes Element zu sich selbst invers ist, also $\underline{A}_j^* \ \underline{A}_k^* = \underline{A}_k^* \ \underline{A}_j^*$ sowie $\underline{A}_j^* \ \underline{A}_j^* = \underline{A}_o^*$ gilt, genügt es statt der 9 Variationen nur 3 davon zu berechnen.

Für die Vektoren $\underline{A}_j^*$, $j \in \{0,1,2,3\}$ wird bis auf weiteres auf * verzichtet. Es gilt: $\underline{A}_1 \cdot \underline{A}_2 = \underline{A}_3$, $\underline{A}_1 \cdot \underline{A}_3 = \underline{A}_2$ und $\underline{A}_2 \cdot \underline{A}_3 = \underline{A}_1$. Die so gebildete Matrix der Terme 2. Grades wird mit $\underline{\underline{A}}_q^*$ bezeichnet, nach Berücksichtigung des Faktors 1/2 bei $\underline{\underline{A}}^*$ folgt für $\underline{\underline{A}}_q^*$ der Faktor 1/4.

$$\underline{\underline{A}}_q^* = 1/4 \begin{array}{c} \begin{matrix} 11 & 12 & 13 & 21 & 22 & 23 & 31 & 32 & 33 \end{matrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \end{array} \qquad (3.5.5.).$$

Bei der Bildung der Vorzeichenmuster-Matrix für die Terme 3. Grades müssen die Variationen der Tripel von Spaltenindizes gebildet werden: $j, h, g \in \{1,2,3\}$, d.h. es gibt 27 Variationen m. W. Wieder werden die Spaltenindextupel in lexigraphischer Reihenfolge angeordnet. Bei der Matrix der Terme 3. Grades $\underline{\underline{A}}_c^*$ tritt der Faktor $f = 1/8$ auf.
Die Berechnung der Spaltenvektoren muß auch hier nicht über alle 27 Variationen m. W. ausgeführt werden. Denn wegen der Kommutativität der Gruppe D_2 führen alle Permutationen der Indizes zum gleichen Ergebnis. Für jedes vollständig gemischte Produkt gilt: $\underline{A}_j \cdot \underline{A}_h \cdot \underline{A}_g = \underline{A}_o$,mit $g \neq j \neq h \neq g$, sind zwei Indizes gleich, so ist das Produkt gleich dem des dritten:

$$\underline{A}_j \cdot \underline{A}_j \cdot \underline{A}_g = \underline{A}_g \quad \text{für alle } g.$$

$$\underline{\underline{A}}_c^* = 1/8 \begin{array}{c} \begin{matrix} \cdot & \cdot & | & \cdot & | \end{matrix} \\ \begin{pmatrix} + & + & + & + & + & + & + & + & + & + & + & + & + \\ + & - & - & - & + & + & - & + & + & - & + & + & - \\ - & + & - & + & - & + & - & + & - & + & - & + & - \\ - & - & + & - & - & + & + & + & - & - & - & + & + \end{pmatrix} \end{array} \qquad (3.5.6.).$$

Zur kompakteren Schreibung wird der Wert 1 fortgelassen und nur das Vorzeichen + oder - angegeben, die Punkte über der ersten Zeile dienen zur Orientierung.

3.5.4. Transformation der Vorzeichenmuster-Matrizen.

Bei der Untersuchung der ersten Gleichung brachte die Transformation des Gleichungssystems in ein äquivalentes Gleichungssystem durch die Matrix $\underline{\underline{A}}$ größere Übersicht. Die Transformation des GlS bedeutet eine Bildung der Matrizenprodukte von links mit den Vorzeichenmuster-Matrizen. Da die Zeilenvektoren der Matrix $\underline{\underline{A}}$ gleich den 4 Vektoren $\underline{A}_j$, $j \in \{0, 1, 2, 3\}$ sind, die die Spalten der Vorzeichenmustermatrizen bilden und die Matrizenmultiplikation als Skalarproduktbildung der Zeilenvektoren der linken Matrix mit den Spaltenvektoren der rechten Matrix aufgefaßt werden kann, müssen die Skalarprodukte der Zeilenvektoren der Matrix $\underline{\underline{A}}$ betrachtet werden. Da die Matrix $\underline{\underline{A}}$ orthogonal ist, sind nur die Skalarprodukte der Vektoren mit sich selbst von Null verschieden, während alle anderen verschwinden:

$$\langle \underline{A}_j^*, \underline{A}_k^* \rangle = \begin{cases} 0 & j \neq k \\ 4 & j = k \end{cases}.$$

Es gilt also:

$$(3.5.3.) \qquad \underline{A}_a = \underline{\underline{A}}\,\underline{A}_a^* = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{A}_1 = \underline{\underline{A}}\,\underline{A}_1^* = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$(1/2)\ \underline{A}'_q = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{A}_q^* \ , \quad (1/4)\ \underline{A}'_c = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{A}_c^* \ ;$$

$$\underline{\underline{A}}'_q = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (3.5.7.)$$

$$\underline{\underline{A}}_c^1 = \begin{pmatrix} 0&0&0&0&0&1&0&1&0&0&0&1&0&0&0&1&0&0&0&1&0&1&0&0&0&0&0 \\ 1&0&0&0&1&0&0&0&1&0&1&0&1&0&0&0&0&0&0&0&1&0&0&0&1&0&0 \\ 0&1&0&1&0&0&0&0&0&1&0&0&0&1&0&0&0&1&0&0&0&0&0&1&0&1&0 \\ 0&0&1&0&0&0&1&0&0&0&0&0&0&0&1&0&1&0&1&0&0&0&1&0&0&0&1 \end{pmatrix} \quad (3.5.8.).$$

3.5.5. Die Gleichungen im transformierten Gleichungssystem.

Nach 3.5.1. hat die erste Gleichung im transformierten GlS die Gestalt: $2(t\Psi - \varphi q) + (1/2) \sum_{i=1}^{4} (f_i e_i - s b_i d_i - \mathcal{H} \varphi d_i^2) - (1/2) \sum_{i=1}^{4} \mathcal{H} b_i d_i^2 = 0$ (3.5.9.).

Die Matrizen $\underline{\underline{A}}_q$ und $\underline{\underline{A}}_c$ ermöglichen es, die Terme 2. und 3. Grades in den Variablen y_h, y_v, $y_d = y_j$, $j \in \{1,2,3\}$ auszudrücken. Die erste Zeile von $\underline{\underline{A}}_q$ gibt an, daß alle gemischten Terme 2. Grades verschwinden und nur drei quadratische Terme übrigbleiben. Die Form 2. Grades in der ersten Gleichung lautet: $-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{3} (\varepsilon_j + \beta_j \delta_j s + \mathcal{H} \varphi \delta_j^2) y_j^2$ (3.5.1o.)

Die erste Zeile von $\underline{\underline{A}}_c$ gibt an, daß nur die völlig gemischten Terme 3. Grades nicht verschwinden.

Die Form 3. Grades in der ersten Gleichung lautet: mit $k = j + 1 \bmod 3$, $l = k + 1 \bmod 3$, $-(1/2) \mathcal{H} \sum_{j=1}^{3} \beta_j \delta_k \delta_l y_1 y_2 y_3$ (3.5.11.).

(12). $2(t\Psi - \varphi q) - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{3} y_j^2 (\varepsilon_j + \beta_j \delta_j s + \mathcal{H} \varphi \delta_j^2) - \frac{1}{2} \mathcal{H} \sum_{j=1}^{3} \beta_j \delta_k \delta_l y_1 y_2 y_3 = 0$

Für die restlichen drei Gleichungen verschwinden die von den Unbekannten freien Terme. Von den linearen Termen sind für jede Gleichung nur die mit der ihr zugehörigen Variablen vorhanden. Von den Termen 3. Grades sind die rein cubischen der zugehörigen Variablen vorhanden, die vollständig gemischten fehlen, die aus den quadratischen der jeweils anderen und aus der zugehörigen Variablen gemischten sind vorhanden. Damit läßt sich ein dreidimensionales GlS in Komponentenschreibweise folgendermaßen angeben:

$i \in \{1,2,3\}$, $j = i + 1 \bmod 3$, $k = j + 1 \bmod 3$

$$(t - \varepsilon_i\psi - s\varphi\delta_i - q\beta_i)\gamma_i - \tfrac{1}{2}(\varepsilon_j + \varepsilon_k + s(\beta_j\delta_k + \beta_k\delta_j) + 2\varkappa\varphi\delta_j\delta_k)\gamma_j\gamma_k$$

$$- \frac{\varkappa}{4}\left[\beta_i\left(\sum_{\ell=1}^{3}\delta_\ell^2\gamma_\ell^2\right) + 2\delta_i(\beta_j\delta_j\gamma_j^2 + \beta_k\delta_k\gamma_k^2\right]\gamma_i = 0 \qquad (3.5.13.)$$

Die erste Gleichung läßt sich nach ψ auflösen:

$$\psi = \varkappa q/t + \left(\sum_{j=1}^{3}(\varepsilon_j + \beta_j\delta_j s + \varkappa\varphi\delta_j^2)\gamma_j^2\right)/4t$$
$$+ \left(\varkappa\sum_{j=1}^{3}\beta_j\delta_k\delta_\ell\gamma_1\gamma_2\gamma_3\right)/4t, \quad k = j+1 \bmod 3, \ \ell = k+1 \bmod 3 \qquad (3.5.14)$$

Wird für den Vektor $\underline{y}$ eine der Darstellungen aus 3.4.2. eingesetzt, z.B. $\underline{y}^T = (o, 2w, o)$, so geht ψ in die Lösung der Funktion ψ für einfache innere Symmetrie über.

Der Quasiparameter ψ kommt in den 3 restlichen Gleichungen linear vor; ψ läßt sich aus dem GlS eliminieren. Dadurch läßt sich nicht nur formal ein 3-dimensionales Gleichungssystem gewinnen.

Die i-te Gleichung des 3-dimensionalen GlS lautet nach Elimination von ψ ; mit $i \in \{1,2,3\}$, $j = i + 1 \bmod 3$, $k = j + 1 \bmod 3$, $m = l + 1 \bmod 3$, $n = m + 1 \bmod 3$ (3.5.15.):

$$(t - \varphi q\varepsilon_i/t - s\varphi\delta_i - q\beta_i)\gamma_i$$
$$- \tfrac{1}{2}(\varepsilon_j + \varepsilon_k + s(\beta_j\delta_k + \beta_k\delta_j) + 2\varkappa\varphi\delta_j\delta_k)\gamma_j\gamma_k$$
$$- \frac{1}{4}\left[\varkappa\left(\beta_i\sum_{\ell=1}^{3}\delta_\ell^2\gamma_\ell^2 + 2\delta_i(\beta_j\delta_j\gamma_j^2 + \beta_k\delta_k\gamma_k^2)\right)\right.$$
$$\left. + \frac{\varepsilon_i}{t}\left(\sum_{\ell=1}^{3}(\varepsilon_\ell + \beta_\ell\delta_\ell s + \varkappa\varphi\delta_\ell^2)\gamma_\ell^2\right)\right]\gamma_i$$
$$+ \left(\varkappa\varepsilon_i/4t\right)\left(\sum_{\ell=1}^{3}\beta_\ell\delta_m\delta_n\right)\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_i = 0$$

In anderer Zusammenfassung lassen sich neue Koeffizienten einführen:

$$a_{1i}\ \gamma_i + a_{2i}\ \gamma_j\gamma_k + a_{3ii}\ \gamma_i^3 + a_{3ij}\ \gamma_i\gamma_j^2 + a_{3ik}\ \gamma_i\gamma_k^2$$
$$+ a_{4i}\ \gamma_i^2\gamma_j\gamma_k = o, \quad \text{dabei gilt:} \qquad (3.5.16.)$$

$$a_{1i} = t - \varphi(\varepsilon_i q/t + \delta_i s) - \beta_i q, \quad a_{2i} = \tfrac{1}{2}(\varepsilon_j + \varepsilon_k + s(\beta_j\delta_k + \beta_k\delta_j) + 2\varkappa\varphi\delta_j\delta_k),$$

$$a_{3ii} = \tfrac{1}{4}(\varkappa\beta_i\delta_i^2 + \varepsilon_i(\varepsilon_i + s\beta_i\delta_i + \varkappa\varphi\delta_i^2))/t,$$

$$a_{3ie} = -\frac{1}{4}\left(\mathcal{H}\left(\beta_i \delta_e^2 + 2\beta_e \delta_i \delta_e\right) + \varepsilon_i\left(\varepsilon_e + s\beta_e \delta_e + \mathcal{H}\varphi\delta_e^2\right)/t\right), \quad i \in \{j, k\}$$

$$, \quad j = i + 1 \bmod 3, \quad k = j + 1 \bmod 3,$$

$$a_{4i} = -\frac{1}{4t}\mathcal{H}\varepsilon_i \sum_{e=1}^{3} \beta_e \delta_m \delta_n \qquad m = l + 1 \bmod 3, \; n = m + 1 \bmod 3.$$

Das Problem, die Lösung für die st.-st. zu finden, ist damit auf die Lösung eines algebraischen GlS von 4. Grad überführt.

Nach einem Satz von Bézout hat ein n-dim. GlS m-ten Grades genau m^n Lösungen im komplexen Raum, wobei die Lösungen entsprechend ihren Vielfachheiten gezählt werden. Damit sind für das vorliegende GlS 64 Lösungen zu erwarten.

Die Reduzierung des ursprünglichen GlS auf das 3-dim. wurde nur bei einem Schritt mit einem Vorbehalt gemacht, nämlich beim Ausmultiplizieren des Reaktionsterms φ. Jede Lösung des 3-dim. GlS, die auch Lösung des Nennerpolynoms von φ ist, muß darauf überprüft werden, ob sie zu einer Lösung des ursprünglichen GlS gehört; alle anderen Lösungen lassen sich in Lösungen des ursprünglichen GlS transformieren.

Auch die Bestimmungsgleichung für die Summen-Konzentrations-Komponente ψ läßt sich zusammenfassen:

$$\psi = \psi_S + \sum_{j=1}^{3} c_{2j} y_j^2 + \sum_{j=1}^{3} c_{3j} y_1 y_2 y_3 \qquad (3.5.19.),$$

wobei ψ_S der ψ-Wert für den vollsymmetrischen Fall ist. Die Summe der Konzentrationen der Substanz y ist im Gegensatz zu der der Substanz x keine Konstante, diese ist nämlich für jeden st.-st. gleich dem Flußparameter χ, sondern eine Funktion vom jeweiligen st.-st..

ψ könnte zur Charakterisierung der st.-st. dienen. Es gilt:

$$\psi_S = \psi_q / t, \quad c_{2j} = \left(\varepsilon_j + s\beta_j \delta_j + \mathcal{H}\varphi\delta_j^2\right)/4t,$$

$$c_{3j} = \mathcal{H}\beta_j \delta_k \delta_e / 4t \qquad , \; k = j + 1 \bmod 3, \; l = k + 1 \bmod 3 \; (3.5.2o.).$$

Die gruppentheoretische Typisierung der st.-st. ist wesentlich durchsichtiger.

3.6. Gruppentheoretische Betrachtungen für das 3-dim. Gleichungssystem.

Auch für das 3-dim. GlS gelten gruppentheoretische Aussagen. Im 4-dim. Raum lassen sich die SO als Permutationsmatrizen $\underline{\underline{P}}_i(4)$ darstellen, wenn die Basis auf die Konzentrationen in den 4 Zellen bezogen ist; oder die SO lassen sich als Block- oder sogar Diagonalmatrizen darstellen, wenn die Basis symmetrieangepaßt ist, $\underline{\underline{S}}_i(4)$. Die Basistransformation wird durch die Matrix $\underline{\underline{A}}$ vermittelt:

$$\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{P}}_i(4) \cdot \underline{\underline{A}} = \underline{\underline{S}}_i(4) \quad ; \quad \underline{\underline{P}}_i(4) = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{S}}_i(4) \cdot \underline{\underline{A}} \qquad (3.6.1.).$$

Die SO des symmetrieangepaßten GlS wirken nicht als Vertauschungen der Indizes der Variablen (Permutationen), sondern unter ihrer Wirkung werden die Varibalen, die einen invarianten Teilraum aufspannen, in sich überführt, d.h. die wesentliche Eigenschaft der symmetrieangepaßten Variablen bleibt erhalten (vgl. 3.2.4.).

Für etliche SO der Gruppe D_4 wird eine Blockdiagonalisierung erreicht. Ein zugehöriger invarianter Teilraum (TR) ist 2-dim.. Für alle SO der Gruppe D_4 ist aber ein 1-dim. TR invariant und punktweise fest, nämlich der, der zur Komponente y_s gehört. Dieser TR zerfällt sogar vollständig in Fixpunkte dieser SO.

Nach Einschränkung aller SO der D_4- Gruppe auf den 3-dim. TR, zu dem nicht y_s gehört, lassen sich die SO wie folgt darstellen:

$$\underline{\underline{E}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{C}}_{2,1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{C}}_{2,2} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{C}}_{2,3} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\underline{\underline{\sigma}}_{d1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{\sigma}}_{d2} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{S}}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{S}}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (3.6.2.).$$

Die SO $C_{2,i}$ sind Drehungen um die Raumachsen y_i; $i \in \{1,2,3\}$ um 180° , $\{1,2,3\} \quad \hat{=} \quad \{h,v,d\}$.

Die SO δ_{di} sind Spiegelungen an einer festen Ebene; und zwar der Ebene, in der die y_d -Achse und außerdem die erste bzw. zweite Winkelhalbierende der $y_h - y_v$ - Ebene d_1 bzw. d_2 liegt.

Die SO E ist die Identität.

Die beiden übrigen SO sind Kombinationen aus Drehungen und Spielgelungen; ihre Matrizen werden mit $\underline{\underline{S}}_1$ bzw. $\underline{\underline{S}}_2$ bezeichnet.

Es gilt zum Beispiel: $\underline{\underline{S}}_1 = \underline{\underline{\delta}}_{d2} \cdot \underline{\underline{C}}_{2,1} = \underline{\underline{C}}_{2,1} \cdot \underline{\underline{\delta}}_{d1} \quad - \underline{\underline{C}}_{2,2} \cdot \underline{\underline{\delta}}_{d2} = \underline{\underline{\delta}}_{d1} \cdot \underline{\underline{C}}_{2,2}$,

S_1 und S_2 gehören zu den Drehoperatoren C_4 und C_4^3 im $\mathbb{R}^4$, während die δ_{di} und δ_{di} Operationen im $\mathbb{R}^3$ und $\mathbb{R}^4$ zusammengehören, allerdings mit vertauschten Indizes. Ebenso gehören $C_{2,i}$ und δ_i im $\mathbb{R}_3$ und $\mathbb{R}_4$ zusammen mit Indexvertauschung.

Die SO der Drehung um 180° $C_{2,i}$ und die Identität ϵ bilden die Gruppe D_2 , die Determinante ihrer Matrizen ist + 1, während die der übrigen vier SO - 1 ist.

Ähnlich wie das nichtreduzierte GlS ist auch das 3-dim. GlS invariant unter allen SO der D_2-Gruppe. Da die Darstellung der Gruppe im $\mathbb{R}_3$ aber nicht durch Permutationsmatrizen erfolgt, sondern die Diagonalmatrizen Vorzeichenumkehr der Variablen bewirken, wird das GlS nach Anwendung der SO auf die Variablen durch die entsprechende Vorzeichenumkehr der einzelnen Gleichungen wieder in seine ursprüngliche Form gebracht. Die Vorzeichenwahl der einzelnen Gleichungen ist genauso willkürlich, wie die Reihenfolge der Gleichungen im GlS.

Jedem möglichen Muster der Substanzverteilung in den Kompartementen entspricht ein Punkt im $\mathbb{R}^3$. Zu dem vollständig symmetrischen Muster gehört der Ursprung. Zu den Mustern mit einfacher innerer Symmetrie gehören Punkte auf den Achsen. Zu den allgemeinen Mustern und ihren Bahnen gehören Punkte, die zusammen mit ihren Verbindungslinien Tetraeder bilden, deren Kantenmit-

ten auf den Achsen liegen. D.h. die Bahnen der Punkte im 1. Oktanten führen zu Punkten im 3., 6. und 8. Oktanten, und die Bahnen der Punkte im 2. Oktanten führen zu Punkten im 4., 5. und 7. Oktanten. Im 1. Oktanten sind alle Variablen positiv, während sie im 7. alle negativ sind.

Damit bietet das 3.-dim. GlS die Möglichkeit, die Muster ohne innere Symmetrie in zwei Klassen aufzuteilen, nämlich solche, deren Bahnen im $\mathbb{R}^3$ durch den 1. bzw. solche deren Bahnen durch den 7. Oktanten gehen.

Gilt bei der speziellen Parameterwahl mit gleichen Permeationskonstanten in jeder Richtung die D_4 - Gruppe, so sind weitere Bahnen möglich, z.B. auch solche, die 8 Punkte enthalten. Da die zusätzlichen SO der Gruppe D_4 Spiegelungen an den Flächen der Winkelhalbierenden und die entsprechenden Drehspiegelungen sind, geht auch unter D_4 - Symmetrie keine Bahn durch alle 8 Oktanten.

Tab. 3.6.

Übersicht über alle Klassen von Mustern, die entweder bei D_2 oder D_4 Symmetrie auftreten. Charakterisiert durch die Standgruppe und die Bahn im $\mathbb{R}^3$.

Standgruppe		Ordnung der Bahn	Form der Bahn	Lage der Bahn	Bahn durch
D_4	D_2	1	Ein Punkt	Ursprung	
-	$C_{2,1}$	2	2 Punkte	Achse 1 (y_h)	
-	$C_{2,2}$	2	"	" 2 (y_v)	
D_{2d}	$C_{2,3}$	2	"	" 3 (y_d)	
($C_{2,1}$, $C_{2,2}$)	-	4	Quadrat	Achsen (1 & 2)	
(C_{2d1}, C_{2d2})	-	4	Tetraeder	Diagonal-	1. Okt.
(C_{2d1}, C_{2d2})	-	4	"	Flächen	7. "
-	E	4	"	allgemein	1. "
-	E	4	"	"	7. "
E	-	8	Hexaeder	symm. zu	1. "
E	-	8	"	Diag. Fläch.	7. "

Der Standgruppe $C_{2,1}$ im $\mathbb{R}^3$ entspricht die Standgruppe C_{2v} im $\mathbb{R}^4$. Hier sind $\mathbb{R}^3$ - Standgruppenbezeichnungen angegeben. Für das Muster im $\mathbb{R}^4$, das invariant gegen die SO der C_{2v} - UG ist, sind nur die Permeationskonstanten der horizontalen Membran relevant, p_{hi}, $i \in \{x,y\}$.

3.7. Den Mustern lassen sich Zahlentupel zuordnen.

i) Die Ordnungen der Bahnen sind Potenzen von zwei, so daß diese Potenzen zur Charakterisierung der Anzahl der äquivalenten Muster ausreichend sind.

ii) Die Lage läßt sich für die Ordnung ≤ 2 durch die Achsen bestimmen. Für die Ordnung ≥ 4 läßt sich die Lage eindeutig durch einen Oktanten, durch den die Bahn läuft, bestimmen, d.h. durch 1 oder 2. (Die Bahn durch den 2. Oktanten geht auch durch den 7. Oktanten) Für die quadratische Bahn, die in der h,v- Ebene verläuft, wird die Lage willkürlich durch die Summe der Achsen, d.h. mit 3 bezeichnet.

iii) Die innere Symmetrie für Muster, deren Bahn die Ordnung 4 hat, wird mit der Ordnung der Standgruppe bezeichnet, d.h. für E mit 1 und für C_{2d} mit 2.

Die Lage der Bahn bei tetraederförmigen Bahnen der Ordnung 4 durch die Oktanten 1 bzw. 2 ist bei der Darstellung als Mustertypen in der Abb.3.7. nicht sichtbar, erst bei der Betrachtung konkreter Zahlenwerte tritt diese Klassifizierung in Erscheinung. Dasselbe gilt auch für die Mustertypen der Hexaederbahnen der Ordnung 8.

In der Typisierung bedeutet der erste Zahlenwert die Potenz der Ordnung der Bahn, der zweite die Lage der Bahn und der eventuell auftretende dritte gibt Auskunft über die innere Symmetrie der Muster und damit implizit über die Gruppe D_2 bzw. D_4 zu der das Muster gehört. Hier sind wieder die $\mathbb{R}^4$-Standgruppenbezeichnungen angegeben.

Abb. 3.7.

Den Mustertypen lassen sich folgende Zahlentupel zuordnen:

charakter. Tupel	Muster der Größensorten	Vektor des Musters	Standgruppe D_4	Standgruppe D_2
(0)	a a / a a	(a,a,a,a)	D_4	D_2
(1,1)	a a / b b	(a,a,b,b)	-	C_{2v}
(1,2)	a b / a b	(a,b,a,b)	-	C_{2h}
(1,3)	a b / b a	(a,b,b,a)	D_{2d}	C_{2d}
(2,1,1) (2,2,1)	a b / c d	(a,b,c,d)	-	E
(2,1,2) (2,2,2)	a b / c a	(a,b,c,a)	C_{2d1}	-
	b a / a c	(b,a,a,c)	C_{2d2}	-
(2,3)	a b / a b	(a,b,a,b)	C_{2h}	-
	a a / b b	(a,a,b,b)	C_{2v}	-
(3,1) (3,2)	a b / c d	(a,b,c,d)	E	-

Algebra: arab. al-dschahr: das Zusammenbringen von getrennten Teilen; z.B. gebrochene Knochen heilen.

Im Iraq 810 n.u.Z. Muhammed ibn Musa al Chwarazmi " Hisah al Dschahr wa'l-Muqabala " Die Kunst, Unbekannte so zusammenzubringen, daß sie einer bekannten Menge entsprechen.

4. Parameterraumuntersuchungen.

4.1. Existenzgrenzen.

4.1.1. Allgemeine Grenzbedingungen.

Negative oder komplexe Werte sind für Substanzkonzentrationen nicht möglich. Das gilt auch für die Werte der dimensionslosen Funktionen der Substanzkonzentrationen, aber nicht für die Werte in Bezug auf die symmetrieangepaßte Basis, so daß für die Existenzgrenzen auch die Basistransformationen ausgeführt werden müssen.

Die Existenz bezieht sich immer auf alle Muster einer Bahn, denn wenn in einem Muster m für die Substanz l im Kompartement k ein chemisch nicht möglicher Wert auftritt, gibt es im äquivalenten Muster n ein Kompartement j mit demselben chemisch nicht möglichen Wert.

Da die Reaktion r eine Funktion der Substanzkonzentrationen ist, und da diese nur mit positiven Vorzeichen in diese Funktion eingehen, kann r formal wie eine Substanz betrachtet werden: d.h. es lassen sich drei " Substanzen" unterscheiden: $v_1 = x$, $v_2 = y$, $v_3 = r$.
Nach 3.3.2. gilt bei einem st.-st. allgemein für die Konzentration irgendeiner "Substanz" v_l in irgendeinem Kompartement j : $v_{lj} = z_l + D_{lj}$ (4.1.1.).
Wobei z_l der Konzentrationswert der Summenfunktion der Substanz l ist, $z_l = \sum_j v_{lj}/4$ und D_j die Abweichung davon im Kompartement j .
Die Abweichungen sind reelle Funktionen der Variablen. Z.B. im Bezug auf die symmetrieangepaßte Basis gilt: die Abweichungsvektoren sind Produkte aus der Vorzeichenmatrix $\underline{\underline{A}}^*$, der Transportparametermatrix $\underline{\underline{\Delta}}_l$ und dem Variablenvektor $\underline{F}^T = (y_1, y_2, y_3)$: $\underline{D}_l = \underline{\underline{A}}^* \cdot \underline{\underline{\Delta}}_l \cdot \underline{F}$ (4.1.2.).

Für nicht reelle Lösungen in $\underline{F}$ kann es keine reellen Lösungen für alle v_{lj} geben, da zwei der z_l nach Definition reell sind, nämlich φ und χ

Für einen negativen Wert in einem z_l , gibt es mindestens für ein j einen negativen Wert v_{lj} . Damit ein Muster eines bestimmten Typs i chemisch möglich ist, muß bei jedem Muster die größte mögliche negative Ab-

weichung D_{1ij} betragsmäßig kleiner sein als z_{1i} . Hier wird mit i ein weiterer Index eingeführt, der den Mustertyp angibt. So gilt z.B. für Muster, deren Bahn durch den 7. Oktanten im $\mathbb{R}^3$ geht, der größte negative Wert der Abweichung ist durch den Ausdruck gegeben:

$$-\sum_{n=1}^{3} \Delta_{n\ell} \cdot |Y_{ni}| = \mathrm{Min}\left(\bigwedge_{j \in \{1,2,3,4\}} D_{\ell ij}\right) \qquad (4.1.3.).$$

Die Exsistenz eines st.-st. vom Typ i ist gegeben, wenn die drei Bedingungen erfüllt sind:

$$1.\ \bigwedge_{n \in \{1,2,3\}} Y_{ni} \in \mathbb{R}, \quad \bigwedge_{\ell \in \{1,2,3\}} z_{\ell i} \in \mathbb{R},$$

$$2.\ z_{\ell i} \geq 0$$

$$3.\ \bigwedge_{\ell \in \{1,2,3\}} \left(\left|\mathrm{Min}\left(\bigwedge_{j \in \{1,2,3,4\}} D_{\ell ij}\right)\right| < z_{\ell i}\right) \qquad (4.1.4.).$$

4.1.2. Existenzuntersuchungen für st.-st. mit innerer Symmetrie.

Für st.-st. Lösungen mit innerer Symmetrie ließen sich algebraische Ausdrücke angeben. Nach den gruppentheoretischen Betrachtungen ist die Ordnung der Bahn für st.-st. mit einfacher innerer Symmetrie zwei. Der algebraische Ausdruck bestätigt, daß die Lösungen paarweise zusammenhängen. Die Lösungen liegen auf den Achsen im $\mathbb{R}^3$, auf jeder Achse liegt sogar höchstens ein Paar Lösungen symmetrisch zum Ursprung, d.h. zur vollsymmetrischen Lösung. Damit sind 7 Lösungen algebraisch zugänglich. Für jede Lösung mit innerer Symmetrie gilt für mindestens zwei $i,\ i \in \{1,2,3\}$: $y_i = 0$, so daß das 3 -dim. System vollständig entkoppelt ist, und daher gilt eine der drei Gleichungen: $\left(a_{1i} + a_{3ii}\ y_i^{\,2}\right) y_i = o$ (4.1.5.) oder mit der Koordinate $w_i = y_i/2$ gilt: $a_{1i} + 4\, a_{3ii}\, w_i^{\,2} = 0$ (4.1.6.).

Für den vollsymmetrischen st.-st. gilt insbesondere:

$$\bigwedge_{i \in \{1,2,3\}} y_i = 0 \qquad (4.1.7.)$$

Damit folgen für die Existenzbedingungen dieselben Forderungen, wie für das System ohne Transport, d.h. : $z_{1o} \in \mathbb{R}$, $z_{1o} \geq 0$.

Zur Gewinnung der Lösungen mit einfacher Symmetrie muß eine quadratische Wurzel aus dem Quotienten von Parameterpolynomen gezogen werden:

$$w = \pm \sqrt{- a_{1i} / (4 a_{3ii})} \qquad (4.1.8.).$$

Wenn die Vorzeichen von a_{1i} und a_{3ii} nicht übereinstimmen, ist die Wurzel reell, andernfalls ist sie imaginär, und daher chemisch nicht relevant. $a_{1i} = 0$ bzw. $a_{3ii} = 0$ sind also Grenzkurven der Existenz im Parameterraum. Wenn $a_{1i} = 0$ und $a_{3ii} \neq 0$ gilt, stimmt die vollsymmetrische Lösung mit den beiden Lösungen des Paares überein, d.h. die vollsymmetrische Lösung hat die Vielfachheit 3.

Wenn andererseits $a_{3ii} = 0$ gilt, ist der Quotient nicht definiert. Der Grenzübergang von der Seite verschiedener Vorzeichen für a_{1i} und a_{3ii} bei sehr kleinem a_{3ii} zeigt, daß der quadratische Ausdruck w^2 ins unendlich Große auf der reellen Achse wandert. Der Grenzübergang bei gleichem Vorzeichen ist wegen der imaginären Wurzel irrelevant. $a_{3ii} = 0$ ist also die Grenze für nicht endliche gegen nicht reelle Werte der Substanzen.

Zur Bestimmung der Existenzgrenzen gegen negative Werte der Substanzen gilt folgende Zerlegung:

$$v_{1ji} = z_{1i} + \mathrm{sign}(j) \cdot \Delta_{1i} \cdot | w(p_i) | \qquad (4.1.9.),$$

i bezeichnet den Typ des st.-st. mit innerer Symmetrie, $i \in \{0,1,2,3\}$,

l bezeichnet die "Substanz", $l \in \{1,2,3\}$,

j bezeichnet irgendein Kompartement, $j \in \{1,2,3,4\}$.

Die Vorzeichenfunktion sign(j) für das Kompartement j kann nur einen der beiden Werte +1 oder -1 einnehmen, so daß der kleinste Wert von v_{1ji} für sign(j) = -1 erreicht ist.

Für jede "Substanz" und für jeden Typ läßt sich ein kritischer Wert angeben, der von $|w_i|$ nicht überschritten werden darf, wenn der st.-st.-Typ exsistieren soll: $w_{il}^* = z_{1i} / \Delta_{1i}$ (4.1.10.).

Nicht alle "Substanzen" haben im selben Kompartement ihr Minimum.

Der Betrag $|w_i|$ muß kleiner sein als der kleinste mögliche Grenzwert für irgendeine "Substanz" 1. Für das Gebiet der Existenz gilt:

$$|w_i| \leq \text{Min}\left(\widehat{1 \in \{1,2,3\}}\ w_{il}^*\right) \qquad (4.1.11.).$$

Die Substanzsummenfunktionen z_{1i} für die "Substanzen" x und r sind für alle Typen von st.-st. gegeben durch: $z_{1i} = \chi$, $z_{3i} = \varphi$.

Während für die Substanz y gilt: $z_{2i} = \psi_i = \psi_0 + 4\, c_{2i}\, w_i^2$ (4.1.12.).

D.h. nur für die Substanz y hängt die Summenfunktion vom Typ des st.-st. ab, wobei ψ_0 die Summenfunktion des vollsymmmetrischen st.-st. ist. Da c_{2i} bei bestimmten Parametern das Vorzeichen wechselt, kann ψ_i kleiner als ψ_0 sein.

Anstelle mit der komplizierten Nl-Gleichung für die Substanz y läßt sich die Existenzgrenze für y über die Gleichung mit der nicht linearen Reaktion ρ berechnen. Dadurch läßt sich die Grenzgleichung in Faktoren zerlegen, von denen zwei linear von w_i abhängig sind:

$$\eta_j = \psi_i + \omega_i = \frac{(\varphi + \beta_i \omega_i)(q + s\,\delta_i \omega_i + \rho\,\delta_i^2 \omega_i^2)}{(t - \varepsilon_i \omega_i)} \qquad (4.1.13.).$$

Da β_i und ε_i nur für negative Werte definiert sind, können die Faktoren $\rho_j = \varphi + \beta_i w_i$ und $t - \varepsilon_i w_i$ nicht im selben Kompartement negativ werden. Also sind für die Grenzbestimmung die Faktoren $(\varphi + \beta_i |w_i|)$ und $(t + \varepsilon_i |w_i|)$ zu untersuchen.

Für die Grenzwerte, die linear von w_i abhängig sind, gilt also:

$$\omega_{ix}^* = \chi / \delta_i = \omega_{i\delta}^* , \quad \omega_{ir}^* = -\varphi / \beta_i = \omega_{i\beta}^* ,$$

$$\omega_{iy}^* = -t / \varepsilon_i = \omega_{i\varepsilon}^* . \qquad (4.1.14.).$$

Für y tritt außer den linearen noch ein quadratischer Faktor auf:

$$\omega_{iy_{2,3}}^{*} = \left(s \pm \sqrt{1-4\varkappa}\right) / 2\varkappa\delta_i = \omega_{id_{1,2}} \qquad (4.1.15).$$

Die Grenzen, die aus dem nicht linearen Faktor resultieren, sind nur dann reell, wenn $\varkappa < \varkappa^*$ =1/4. Für $\varkappa > \varkappa^*$ ist der Nl-Faktor stets positiv.

Für den Transportparameterausdruck $1 + 2\,p_{ix}$ wird ϑ_i eingeführt, so daß gilt: $\delta_i = -\beta_i / \vartheta_i$ mit $\beta_i = -2\,p_{iy}/\alpha$.
Für die kritischen Werte gilt damit: $\omega_{i\delta}^{*} = \alpha\chi\vartheta_i / 2\,p_{iy}$

$$\omega_{i\beta}^{*} = \alpha\varphi / 2\,p_{iy}\,, \quad \omega_{i\varepsilon}^{*} = \alpha\varphi(\gamma\chi - 1)\vartheta_i / (\gamma\varphi + \vartheta_i)\,2\,p_{iy}\,,$$

$$\omega_{id_{1,2}} = \alpha(1 + 2\varkappa\chi \pm \sqrt{1-4\varkappa})\,\vartheta_i / 4\varkappa\,p_{iy} \qquad (4.1.16).$$

Die kritischen Werte sind Funktionen der Parameter. Als Funktionen des einen Transportparameters p_{iy} d.h. bei festgehaltenem anderen Transportparameter p_{ix} (ϑ_1 = const.) lassen sie sich als Hyperbeläste darstellen, die gegen dieselben Asymptoten streben. ϑ_i läßt sich als Scharparameter auffassen. Für $\vartheta_i = \varphi/\chi$ sind die Kurven $w_{i\beta}^{*}\,(p_{iy})$ und $w_{i\delta}^{*}\,(p_{iy})$ identisch. Für kleinere ϑ_i- Werte ist der Wert von $\omega_{i\delta}^{*}$ kleiner als der Wert von $w_{i\beta}^{*}$. $w_{i\varepsilon}^{*}$ und $w_{i\delta}^{*}$ sind für $\vartheta_i = 0$ und $\vartheta_i = -\varphi/\chi$ identisch, d.h. für nicht mögliche Transportparameterwerte p_{ix}. So ist $w_{i\varepsilon}^{*}$ stets kleiner als $w_{i\delta}^{*}$. $w_{i\varepsilon}^{*}$ und $w_{i\beta}^{*}$ sind für $\vartheta_i = \gamma\varphi/(\gamma\chi - 2)$ identisch. Für $\vartheta_i > \gamma\varphi/(\gamma\chi - 2)$ ist $w_{i\beta}^{*} < w_{i\varepsilon}^{*}$.

D.h. $w_{i\varepsilon}^{*}$ ist für $\varkappa > 1/4$ und für $0 < \vartheta_i < \varkappa\varphi/(\varkappa\chi - 2)$ die gesuchte kleinste kritische Funktion, während für größere ϑ_i, die von ϑ_i unabhängige Funktion $w_{i\beta}^{*}$ kleinste kritische Funktion ist. Da die Grenzwertfunktion $w_{i\varepsilon}^{*}$ als Linearfaktor des Nenners gewonnen wurde, ist ihr Polstellenverhalten zu untersuchen.

Für einen nach unten beschränkten $\varkappa$-Wertebereich $\varkappa < 1/4$ wird w_{id2}^{*} zum kleinsten kritischen Wert. Der Nl-Faktor von η_e wird negativ, falls $w_{id2}^{*} < |w_i| < w_{id1}^{*}$ gilt. Falls außerdem gilt: $w_{i\varepsilon}^{*} < |w_i| < w_{id1}^{*} > |w_i|$, wird in diesem $|w_i|$-Wertebereich auch noch der Nenner von η_e negativ und damit η_e selbst positiv. Falls andererseits gilt: $w_{i\varepsilon}^{*} > |w_i| > w_{id1}^{*}$, wird der Zähler von η_e positiv, wenn der Nenner negativ ist. Auf jeden Fall gilt: für $w_{id2}^{*} < w_{i\varepsilon}^{*}$ gibt es einen Streifen der Nicht-Existenz für $|w_i|$-Werte $> w_{id2}^{*}$. Das Existenzgebiet ist für $\varkappa < 1/4$ nicht zusammenhängend. Auf jeden Fall ist $w_{i\varepsilon}^{*}$ auch hier eine Existenzgrenze.

Für die Existenzgrenze $w_{i\varepsilon}^{*} - |w_i| = 0$ gilt exemplarisch das folgende: $w_{i\varepsilon}^{*}(p_{iy})$ läßt sich als Hyperbelast darstellen. Die Asymptoten sind die Achsen $p_{iy} = 0$ und $w_{i\varepsilon}^{*} = 0$. $|w_i|$ läßt sich als Funktion von ϑ_i und p_{iy} darstellen. Es gilt nach (4.1.8.):

$$|w_i| = \sqrt{-a_{1i}/(4\,a_{3ii})} \quad \text{oder nach (3.4.11.) mit:}$$

$\delta_i = -\beta_i/\vartheta_i$, $\varepsilon_i = \beta_i - \varkappa\varphi\delta_i$, $\beta_i = -2\,p_{iy}/\alpha$ gilt:

$$|w_i| = \frac{\alpha\cdot\vartheta_i}{2\cdot p_{iy}} \sqrt{\frac{\alpha\cdot g_{1Z}^{2}\cdot\vartheta_i + 2\cdot g_{2Z}\cdot p_{iy}}{\alpha\cdot g_{1N}^{2}\cdot\vartheta_i + 2\cdot g_{2N}\cdot p_{iy}}} \qquad (4.1.17.),$$

mit: $g_{1Z} = t$, $g_{1N} = \varkappa\cdot\varphi + \vartheta_i$, $g_{2Z} = \varphi\cdot(\varkappa\cdot\chi\cdot q\cdot\vartheta_i + \varphi\cdot(s - r))$, $g_{2N} = s\cdot\vartheta_i^{2} + u\cdot\vartheta_i - \varkappa\cdot\chi\cdot\varphi^{2}$; $q = 1 + \chi + \varkappa\cdot\chi^{2}$, $s = 1 + 2\varkappa\cdot\chi$, $t = \varphi\cdot(\varkappa\cdot\chi - 1)$, $r = \varkappa\cdot(\varkappa\cdot\chi^{2} - 1)$, $u = \varkappa\cdot\varphi\cdot(1 + \varkappa\cdot\chi)$, $\vartheta_i = 1 + 2\cdot p_{ix}$.

$w_{i\varepsilon}^{*} = (\alpha . t . \vartheta_i)/(2 . g_{2N} . p_{iy})$ ist der zusammengefaßte Ausdruck für den Grenzwert.

Wenn von $| w_i |$ nur die Wurzel betrachtet wird und dann p_{iy} gegen Null strebt, werden die Ausdrücke $| w_i |$ und $w_{i\varepsilon}^{*}$ identisch. Für sehr große p_{iy} -Werte streben $| w_i |$ und $w_{i\varepsilon}^{*}$ gegen die p_{iy} -Achse. Beide Teilfunktionen besitzen dieselben Asymptoten. Aber wenn a_{1i} und a_{3ii} dasselbe Vorzeichen haben, ist $| w_i |$ nicht reell. Für $a_{3ii} \neq 0$ und $a_{1i} = 0$ gilt: $| w_i | = 0$. Für $a_{3ii} = 0$ besitzt $| w_i |$ einen Pol. Die Grenzbedingung $w_{i\varepsilon}^{*} - | w_i | = 0$ bedeutet: $g_{2z}\, g_{1N}^{\,2} - g_{1z}^{\,2}\, g_{2N} = 0$ (4.1.18.),

$$\gamma\varphi(\chi q \delta_i^3 + \varphi((\gamma+3\gamma)\chi^2 + 2(\gamma+1)\chi + 1)\vartheta_i^2 + \varphi^2((\gamma^2+2\gamma+3\gamma)\chi + 2\gamma + 1)\vartheta_i + \varphi^3(\gamma^2\chi^3 - \gamma(2+\gamma\gamma)\chi^2 + (2\gamma\gamma+1)\chi + \gamma(1+\gamma))) = 0 \qquad (4.1.19.).$$

Nur für negative χ -Werte kann ein Vorzeichenwechsel in der Koeffizientenreihe von $\vartheta_i^{\,n}$ auftreten. Nach dem Vorzeichenkriterium von Descartes kann das Polynom bei $\chi > 0$ für keinen positiv reellen ϑ_i -Wert verschwinden, d.h. $| w_i | - w_{i\varepsilon}^{*} = 0$ ist nicht erfüllbar, damit kann der Nenner im Ausdruck η_e nicht verschwinden.

Dennoch wechselt die Funktion $| w_i |$ bei ihrer Polstelle auf die andere Seite von $w_{i\varepsilon}^{*}$, so daß die Polgrenzkurve $a_{3ii} = 0$ gleich der Existenzgrenze für negative Konzentrationen ist. Da die Polgrenzkurve selber aber von der anderen Seite her schon an den Bereich für nicht reelle Lösungen stößt, ist die Kurve $a_{1i} = 0$ die einzige Grenzkurve der Existenz.

Auch die Untersuchung eines möglichen Schnittpunktes der Pol- und der Nullgrenzkurven $a_{3ii} = 0$ und $a_{1i} = 0$ im Transportparameterraum führt auf den Ausdruck (4.1.18.) und bestätigt die Nullgrenzkurve als die gültige Grenzkurve. St.-st. mit einfacher innerer Symmetrie sind nur für einen genügend großen p_{iy} -Wert möglich. (Abb. 4.1.1.)

Die Gleichung für die Existenzgrenzkurve $a_{1i} = 0$ hat folgende Gestalt, wenn die Transportparameter p_{iy} und p_{ix} als Variablen betrachtet werden:

$$p_{iy} = \frac{-\alpha\varphi\ (1-\gamma\chi)^2\ \vartheta_i}{2\,(\varphi\,(s-r) + \gamma\chi\,q\,\vartheta_i)} \qquad (4.1.2o.).$$

Die Kurve stellt einen Hyperbelast dar mit der Konstanten

$p_{iy} = -2\varphi(1-\gamma\chi)^2 / 2\gamma\chi q$ als Asymptote für sehr große Werte von ϑ_i. Außerdem besitzt die Kurve einen Pol bei: $\vartheta_i = \varphi(s-r)/\gamma\chi q$. Der Achsenabschnitt für $p_{ix} = o$ ist: $p_{iy} = -\alpha\varphi(1-\gamma\chi)^2/(2(\varphi(s-r)+\gamma\chi q))$.

Der Verlauf der Kurve wird von den Parametern des Reaktionssystems bestimmt: $(\varphi, \chi, \gamma, \alpha, \varkappa)$.

Für jedes Transportparameterpaar (p_{iy}, p_{ix}), $i \in \{1,2,3\}$ sind die Koeffizienten der Existenzgrenzkurve gleich. Nun ist aber das dritte Paar $i = 3$ abhängig von den ersten beiden, denn es gilt: $p_{3l} = p_{1l} + p_{2l}$, $l \in \{x,y\}$. Für die Funktion $\vartheta_i = 1 + 2\,p_{ix}$ bedeutet das:

$$\vartheta_3 = \vartheta_1 + 2p_{2x} = \vartheta_2 + 2p_{1x}$$

Die Existenzgrenze für den Typ 3 läßt sich also sowohl im Transportparameterunterraum für Typ 1 wie für Typ 2 mit angeben.

Die Kurve $a_{13} = 0$ ist gegenüber der Kurve $a_{1k} = 0$, $k \in \{1,2\}$ um p_{jy} nach unten und um $2\,p_{jx}$ nach links verschoben, bei sonst gleichem Verlauf, wobei $j,k \in \{1,2\}$ und $j = 1 + k \bmod 2$ ist. Wenn p_{jy} und p_{jx} genügend groß sind, schneiden sich beide Kurven, so daß sie vier Gebiete voneinander trennen.

Die Verschiebung der Grenzkurve des Tpys 3 gegenüber der Grenzkurve des Typs 1 bzw. 2 gibt implizit Auskunft über die Existenz der Muster vom Typ 2 bzw. 1, dessen Transportparameter in der Grafik nicht als Variablen betrachtet werden. So lassen sich die acht möglichen Fälle für die Gebiete der Existenz oder der Nicht-existenz der einzelnen Typen durch zwei exemplarische Grafiken mit z.B. Typ 1-Variablen darstellen. Wobei der

Typ 2 im Falle der ersten Grafik nicht existiert und im Falle der 2. Grafik existiert. (Abb. 4.1.2. & 4.1.3.)

Abb. 4.1.1. (zerfällt in die beiden Abb. 4.1.1.1. & 2.)

Bestimmung des Existenzgebietes für die st.-st. vom Typ i.

Abb. 4.1.1.1.

Vergleich zwischen der Funktion $|w_i|$, dem Betrag der Abweichung und der Funktion $w_{i\varepsilon}^{*}$, einem kritischen Wert der Abweichung, als Funktionen des Transportparameters p_{iy}. In einem Kompartement j tritt für den Typ i für die Substanzkonzentration η_{ij} ein negativer Wert auf, wenn der Wert der Funktion $|w_i|$ größer ist als der Wert der kritischen Funktion;

I $\bigvee_{j\in\{1,2,3,4\}} \eta_{ij} \in \mathbb{R}^-$, linkes Gebiet bis zum Pol von $|w_i|$;

II $\eta_{ij} \in \mathbb{C}$, Gebietsstreifen zwischen Pol und Nullwert von $|w_i|$;

III $\bigwedge_{j\in\{1,2,3,4\}} \eta_{ij} \in \mathbb{R}^+$, rechtes Gebiet zwischen Nullwert von $|w_i|$ und ∞

Die Funktion $|w_i|$ besteht aus zwei Ästen (1.1. und 1.2.),

Die Funktion $w_{i\varepsilon}^{*}$ besteht im untersuchten Parameterraum aus einem Hyperbelast (2.).

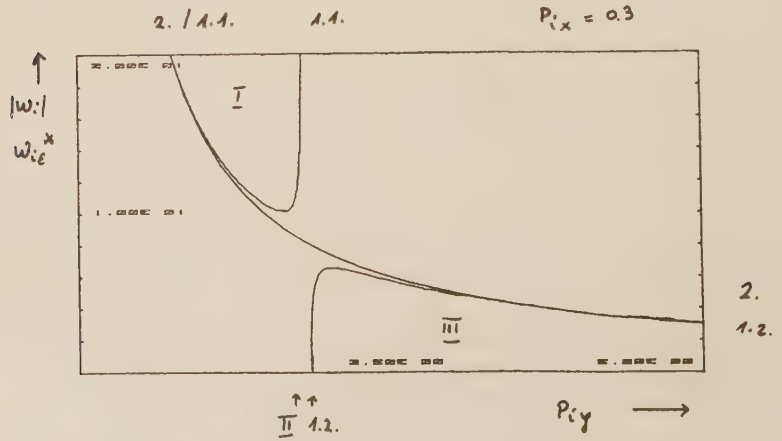
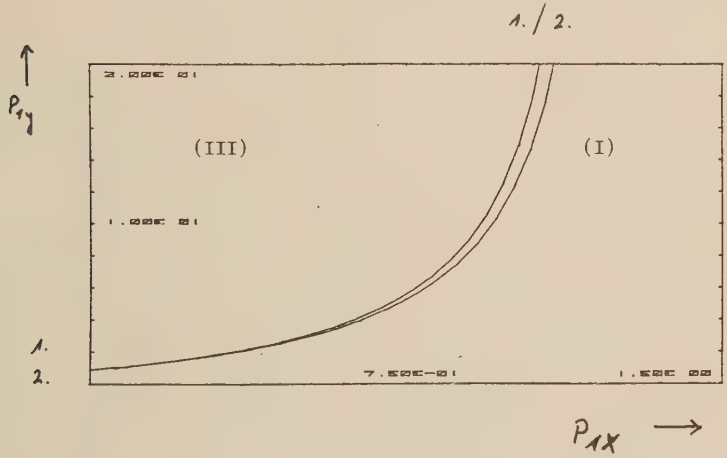


Abb. 4.1.1.2.

Die Kurven für die verschwindenden Koeffizienten a_{1i} und a_{3ii} im Ausdruck für die Unbekannte w_i, z.B. $a_{11} + 4\, a_{311} w_1^2 = 0$ als Funktion der Transportparameter p_{1x}, p_{1y}. Im Gebiet zwischen beiden Kurven ist w_1 komplex, die beiden andern Gebiete entsprechen den in Abb. 4.1.1.1. angegebenen Verhältnissen. $\bigwedge_{j\in\{1,2,3,4\}} \eta_{1j} \in \mathbb{R}^+$, bei großen p_{1y}-Werten, (III);

$\bigvee_{j\in\{1,2,3,4\}} \eta_{1j} \in \mathbb{R}^-$, bei kleinen p_{1y}-Werten, (I).

Die Funktion $a_{11} = 0$ (1.) ist die kritische Grenze für den Zähler der
Die Funktion $a_{311} = 0$ (2.) " " " " " " Nenner der
Diskriminante von w_1. (1.) ist die relevante Existenzgrenze.



$(p_{2x}, p_{2y}) = (0.1, 4.0)$

Abb. 4.1.2.

Grenzkurven der Existenz für die st.-st. (1,1), (1,3) bei nicht existierendem st.-st. (1,2) : (p_{2x} , p_{2y}) = (o.2,1.o)

I , es existiert st.-st (1,1) und (1,3);

II , es " " (1,1) ; III , st.-st. (1,3) existiert;

IV , es " kein st.-st. mit einfacher innerer Symmetrie.

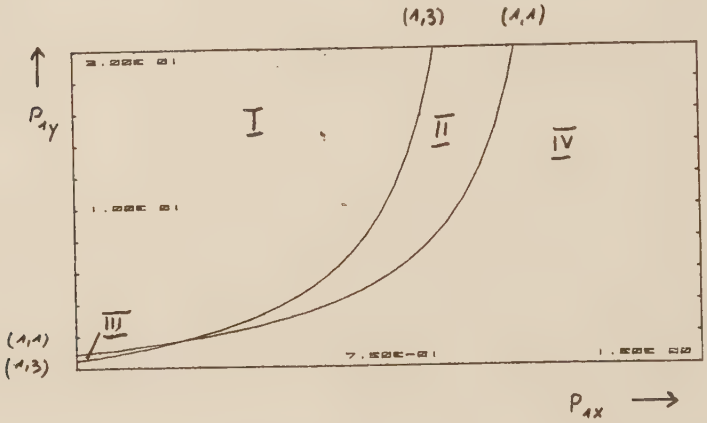


Abb. 4.1.3.

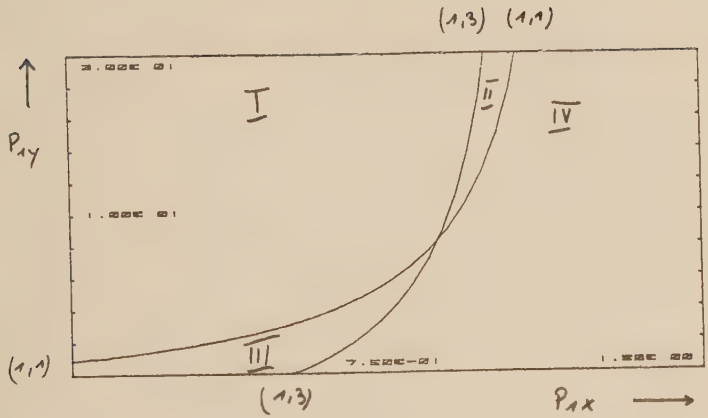
Grenzkurven der Existenz für die st.-st. (1,1), (1,3) bei existierendem st.-st. (1,2) : (p_{2x} , p_{2y}) = (o.1,4.o)

I , es existiert st.-st (1,1) , (1,3.)und (1,2);

II , st.-st. (1,3) existiert nicht; III , (1,1) existiert nicht;

IV , es existiert st.-st. (1,2).

Abb. 4.1.3.



4.1.3. Existenzgrenzbedingungen für st.-st. ohne innere Symmetrie.

Die Grenzen für st.-st. ohne innere Symmetrie lassen sich nicht analytisch angeben. Für Muster, deren Bahnen im 3 -dim. Raum durch den 7. Oktanten gehen, wurde oben im Beispiel eine Grenzbedingung angegeben. Für mögliche Punkte in der Nähe der Achsen gelten nahezu die Grenzwerte der Achsen, das sind die Fälle mit einfacher innerer Symmetrie. Eine Existenzabschätzung liefert die Gleichung für Ψ_i (4.1.12.). Wenn kein y_i klein ist, kommt die Form 3. Ordnung mit den Koeffizienten c_{3j} zum Tragen, diese sind negativ, so daß die Form 2. Ordnung entscheidet, ob Ψ_1 größer als Ψ_S sein kann. Für genügend große Werte y_i überwiegt die Form 3. Ordnung und Ψ_i wird sogar negativ oder wenigstens so klein, daß in einem Kompartement die Konzentration v_{1j} negativ wird, also die Existenzgrenze überschritten ist.

4.2. Stabilitätsgrenzen.

4.2.1. Allgemeine Stabilitätsbedingungen.

Außer der Frage nach der Existenz von stationären Lösungen ist die Frage nach der Stabilität von Interesse. Nicht-stabile Lösungen sind keine stabilen Ruhelagen des Systems, geringste Störungen treiben das System aus diesen Lösungen.

Die Eigenwerte der Funktional- oder Jacobi- Matrix an den st.-st. geben Auskunft über die Stabilität. Negative Realteile der Eigenwerte bedeuten Stabilität, d.h. daß die Trajektorien im um den st.-st. linearisierten System aus der Richtung des zugehörigen Eigenvektors auf den st.-st. zulaufen. Positive Realteile der Eigenwerte bedeuten Instabilität in der Richtung des zugehörigen Eigenvektors. Verschwindende Eigenwerte führen zur Singularität der Funktionalmatrix und das kann bedeuten, daß der stationäre Zustand kein isolierter singulärer Punkt ist; für verschwindende Eigenwerte ist eine besondere Analyse nötig.

Ein st.-st. ist dann stabil, wenn die Realteile aller Eigenwerte negativ sind, wenn irgendein Realteil positiv ist, ist der st.-st. instabil.

Um die Stabilitätsgrenze zu bestimmen, muß der Fall betrachtet werden, in dem die Realteile aller Eigenwerte negativ sind und ein einziger Eigenwert oder der Realteil eines konjugiert-komplexen Paares verschwindet.

Nach dem Descartes´schen Vorzeichenkriterium für Polynome sind dann keine positiven rein reellen Wurzeln vorhanden, wenn alle Koeffizienten das gleiche Vorzeichen haben. Wenn ein einziger Vorzeichenwechsel in der Koeffizientenreihe auftritt, gibt es eine positive rein reelle Wurzel. Das ist z.B. der Fall, wenn der variablenfreie Term ein anderes Vorzeichen hat als alle anderen Terme. Wenn zwei Vorzeichenwechsel auftreten, z.B.

dadurch, daß irgendein Koeffizient ein anderes Vorzeichen hat als alle anderen, kann es ein konjugiert-komplexes Wurzelpaar geben, das einen positiven Realteil hat.

Der größte Eigenwert wird positiv, wenn die Koeffizientenreihe der charakteristischen Gleichung nur einen Vorzeichenwechsel enthält, wenn z.B. nur die Determinate der Funktionalmatrix, die Jacobi-Determinante negativ ist, während alle anderen Koeffizienten, z.B. die Spur der Jacobi-Matrix, positiv sind.

Damit bietet das Verschwinden der Jacobi-Determinante eine Möglichkeit, die Stabilitätsgrenze zu bestimmen. Wenn also die Jacobi-Determinante verschwindet, verschwindet ein Eigenwert, ob es der größte ist, hängt von den Vorzeichen der übrigen Koeffizienten des charakteristischen Polynoms ab.

In symmetrieangepaßten Koordinaten faktorisiert sich die Jacobi-Matrix in Teilmatrizen, dasselbe gilt auch für ihre Determinante, so daß mit der Untersuchung der Teildeterminanten die Bestimmung einer möglichen Stabilitätsgrenze erfolgen kann.

4.2.2. Die Jacobi-Matrix des Reaktions-Transport-Systems.

Die Jacobi-Matrix in symmetrieangepaßten Koordinaten lautet:

$$\begin{pmatrix}
\left(-1-\frac{\partial r_s}{\partial x_s}\right) & -\frac{\partial r_s}{\partial y_s} & -\frac{\partial r_s}{\partial x_h} & -\frac{\partial r_s}{\partial y_h} & \cdots \\
-\alpha\frac{\partial r_s}{\partial x_s} & -\alpha\frac{\partial r_s}{\partial y_s} & -\alpha\frac{\partial r_s}{\partial x_h} & -\alpha\frac{\partial r_s}{\partial y_h} & \cdots \\
-\frac{\partial r_h}{\partial x_s} & -\frac{\partial r_h}{\partial y_s} & \left(-\vartheta_h-\frac{\partial r_h}{\partial x_h}\right) & -\frac{\partial r_h}{\partial y_h} & \cdots \\
-\alpha\frac{\partial r_h}{\partial x_s} & -\alpha\frac{\partial r_h}{\partial y_s} & -\alpha\frac{\partial r_h}{\partial x_h} & \left(-2\,p_{hy}-\alpha\frac{\partial r_h}{\partial y_h}\right) & \cdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots &
\end{pmatrix}$$

(4.2.1.).

Hier sollen wieder statt der Indizes s,h,v,d die Indizes o,1,2,3 benutzt werden. Die nicht-linearen Ausdrücke r_j sind Summen von nicht-linearen Ausdrücken ϱ_i des ursprünglichen Koordinatensystems. Für den Vektor $\underline{r}$ gilt: $\underline{r} = \underline{\underline{A}}\ \underline{\varrho}$. Die Nl-Reaktionsterme des ursprünglichen Koordinatensystems lassen sich mit Hilfe der Transformation $\underline{\xi} = \underline{\underline{A}}\ \underline{x}$, $\underline{\eta} = \underline{\underline{A}}\ \underline{y}$ wieder im Koordinatensystem der symmetrieangepaßten Basis ausdrücken. Letzlich sind bestimmte Linearkombinationen von partiellen Ableitungen $\partial\varrho_i / \partial x_j$ und $\partial\varrho_i / \partial y_j$ zu bilden, $i \in \{1,2,3,4\}$, $j \in \{o,1,2,3\}$. Es gilt z.B. für $\partial\varrho_1 / \partial x_o$:

$$\partial p_1 / \partial x_o = \gamma\varphi\eta_1 (N_1 \cdot (\partial\xi_1 / \partial x_o) - \xi_1 \cdot (\partial N_1 / \partial x_o)) / N_1^2$$

$$\text{mit} \quad N_1 = 1 + \xi_1 + \gamma\xi_1^2 + \eta_1 \qquad (4.2.2.).$$

Es folgt: $\partial \varrho_1 / \partial x_o = \varkappa\varphi\eta_1 (1 + \eta_1 - \varkappa\xi_1^2) / (2 N_1^2)$. (3)

Dieser Ausdruck wird mit f_1 bezeichnet. Außerdem gilt:

$$\partial \varrho_1 / \partial y_o = \varkappa\varphi\xi_1 (1 + \xi_1 + \varkappa\xi_1^2) / (2 N_1^2). \quad (4)$$

Dieser Ausdruck wird mit g_1 bezeichnet. Im allgemeinen gilt:

$$f_i = \partial \varrho_i / \partial x_o = \varkappa\varphi\eta_i (1 + \eta_i - \varkappa\xi_i^2) / (2 N_i^2).$$

$$g_i = \partial \varrho_i / \partial y_o = \varkappa\varphi\xi_i (1 + \xi_i + \varkappa\xi_i^2) / (2 N_i^2).$$

mit $N_i = 1 + \xi_i + \varkappa\xi_i^2 + \eta_i$.

Die andern partiellen Ableitungen lassen sich ähnlich berechnen. Es gilt:

$$\overset{j = i-1}{\underset{\vee\, j = 0}{\wedge}} \quad \partial\varrho_i / \partial x_j = f_i \,, \quad \partial\varrho_i / \partial y_j = g_i \,;$$

$$\overset{j \neq i-1}{\underset{\wedge\, j \neq o}{\wedge}} \quad \partial\varrho_i / \partial x_j = -f_i \,, \quad \partial\varrho_i / \partial y_j = -g_i \,; \quad (4.2.5.)$$

Die in der Jacobimatrix für symmetrieangepaßte Koordinaten auftretenden partiellen Ableitungen sind Linearkombinationen der f_i bzw. g_i . Für diese Ausdrücke werden die Bezeichnungen ϕ_j bzw. Γ_j , $j \in \{o,1,2,3\}$ eingeführt. Es gilt: $\underline{\phi} = \underline{\underline{A}}\ \underline{f}$, $\underline{\Gamma} = \underline{\underline{A}}\ \underline{g}$ (4.2.6.).

Für die Matrix der partiellen Ableitungen gilt z.B. :

$$\left(\frac{\partial r_i}{\partial x_j} \right) = \begin{pmatrix} \phi_o & \phi_1 & \phi_2 & \phi_3 \\ \phi_1 & \phi_o & \phi_3 & \phi_2 \\ \phi_2 & \phi_3 & \phi_o & \phi_1 \\ \phi_3 & \phi_2 & \phi_1 & \phi_o \end{pmatrix} \quad (4.2.7.).$$

Die Jacobi-Matrix für symmetrieangepaßte Koordinaten läßt sich mit (2x2)-Blockmatrizen darstellen:

$$\underline{\underline{J}} = \begin{pmatrix} G_0 & G_4 & G_5 & G_6 \\ G_4 & G_1 & G_6 & G_5 \\ G_5 & G_6 & G_2 & G_4 \\ G_6 & G_5 & G_4 & G_3 \end{pmatrix} \qquad (4.2.8.).$$

Dabei haben die Blockmatrizen folgende Bedeutung; hier wird auf die sonst übliche doppelte Unterstreichung verzichtet. :

$$G_o = -\begin{pmatrix} 1+\phi_o & T_o \\ \alpha\,\phi_o & \alpha T_o \end{pmatrix} ; \qquad \underset{\substack{i \in \{1,2,3\} \\ j = i+3}}{\wedge} \qquad G_j = -\begin{pmatrix} \phi_i & T_i \\ \alpha\phi_i & \alpha T_i \end{pmatrix} ;$$

$$\underset{i \in \{1,2,3\}}{\wedge} \quad G_i = -\begin{pmatrix} \vartheta_i + \phi_o & T_o \\ \alpha\phi_o & 2p_{iy} + \alpha T_o \end{pmatrix} \qquad (4.2.9.).$$

Obwohl die Jacobi-Matrix des untersuchten nicht-linearen GlS nicht die Symmetrie der Gruppe hat, zeigen sich nach der Transformation in die symmetrieangepaßte Basis gewisse Möglichkeiten der Zusammenfassung und Vereinfachung auch bei einem nicht-linearen Operator.

4.2.3. Stabilitätsgrenzen für st.-st. mit vollier innerer Symmmetrie.

Für st.-st. mit innerer Symmmetrie sind im vollsymmetrischa Fall alle f_i bzw. g_i untereinander gleich, so daß alle ϕ_i bzw. T_i ($i \neq 0$) verschwinden. Also enthält die Jacobi-Matrix für den vollsymmetrischen Fall nur die Blockmatrizen in der Diagonale. Die Jacobi-Determinante zerfällt in die vier Faktoren G_i, $i \in \{0,1,2,3\}$.

Für die Fälle mit einfacher innerer Symmetrie sind jeweils 2 Paare f_i bzw. g_i untereinander gleich, so daß z.B. außer ϕ_o auch ϕ_e nicht verschwindet, wobei 1 der Index ist, der den jeweiligen Fall be-

zeichnet, wie in 3.4.2.. Die beiden übrigen ϕ_i $(i \neq 1 \wedge i \neq 0)$ verschwinden. Damit sind in der Jacobi-Matrix jeweils die vier G_j , $j = 1 + 3$ außerhalb der Diagonale von Null verschieden. Während alle anderen Elemente außerhalb der Diagonalen verschwinden. Nach eventuell nötiger Vertauschung von zwei Zeilen und zwei Spalten ist die Jacobi-Matrix für den Typ 1 mit einfacher innerer Symmetrie als Blockdiagonalmatrix darstellbar:

$$\underline{\underline{J}}_1 = \begin{pmatrix} G_o & G_{1+3} & 0 & 0 \\ G_{1+3} & G_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & G_m & G_{1+3} \\ 0 & 0 & G_{1+3} & G_n \end{pmatrix} \qquad (4.2.1o.),$$

mit $1 \in \{1,2,3\}$, wenn $1 = 2$, $m = 1$; wenn $1 \neq 2$, $m = 2$;

wenn $1 = 3$, $n = 1$; wenn $1 \neq 3$, $n = 3$.

Für den vollsymmetrischen Typ sind vier Teildeterminanten und für die Typen mit einfacher innerer Symmetrie je zwei Teildeterminanten zu berechnen. Wenn eine dieser Determinanten verschwindet, verschwindet ein Eigenwert.

Für den vollsymmetrischen Fall haben die Determinanten folgende Gestalt:

$$1.\ \mathrm{Det}\,(G_o) = \alpha(1+\phi_o)T_o - \alpha\phi_o T_o = \alpha T_o \qquad (4.2.11.),$$

$$2.\ \mathrm{Det}\,(G_i) = (\vartheta_i + \phi_o)(2p_{iy} + \alpha T_o) - \alpha\phi_o T_o$$
$$= 2p_{iy}(\phi_o + \vartheta_i) + \alpha T_o \vartheta_i \qquad (4.2.12.).$$

Die Determinante $|\ G_o\ |$ ist nicht von den Transportparametern p_{ix} , p_{iy} abhängig. T_o und ϕ_o sind für den vollsymmetrischen Fall sehr einfach in den Parametern ausdrückbar, weil die Lösungen von ξ und η einfache Parameterausdrücke sind: $T_o = 2g_1$, $\phi_o = 2f_1$;

$$g_1 = \partial\varrho_i / \partial\gamma_o = \varphi(\gamma\chi - 1)^2 / ((1+\chi+\varkappa\chi^2)\cdot 2\gamma\chi),$$

$$f_1 = \partial\varrho_i / \partial\chi_o = \varphi(1+2\varkappa\chi+\gamma(1-\varkappa\chi^2)) / ((1+\chi+\varkappa\chi^2)\cdot 2\gamma\chi)$$

(4.2.13)

Die Γ_o , ϕ_o für die anderen Typen sind nicht so einfach direkt in den Parametern ausdrückbar, weil die Lösungen ξ_i und η_i komplizierte Ausdrücke der Parameter sind, sofern sie überhaupt ausdrückbar sind. Für die Fälle mit einfacher innerer Symmetrie sind aber Γ_o, ϕ_o, Γ_e, ϕ_e grundsätzlich als Parameterausdrücke darstellbar, da die Lösungen für ξ_i und η_i in Abhängigkeit von den Parametern bekannt sind.

Für die verschwindende Determinante $|G_i|$, d.h. für die Stabilitätsgrenzen des vollsymmetrischen Falls folgt: $p_{iy} = -\alpha\Gamma_o\vartheta_i / (2(\phi_o + \vartheta_i))$ (14.). Γ_o, ϕ_o lassen sich auch mit Hilfe der zusammenfassenden Parameterausdrücke aus dem Abschnitt über die Berechnung der Existenzgrenzen ausdrücken:

$$\Gamma_o = t^2 / \gamma\varphi\chi q , \quad \phi_o = \varphi(s-\tau) / \gamma\chi q .$$

Damit gilt für die Stabilitätsgrenzen:

$$p_{iy} = \frac{\alpha t^2}{2\varphi} \; \frac{\vartheta_i}{(\varphi(\tau - s) - \gamma\chi q\vartheta_i)} \qquad (4.2.15).$$

Diese Funktion ist genau gleich der für die Existenzgrenzen der Typen mit einfacher innerer Symmetrie (4.1.2o.), (4.1.17.).

Der vollsymmetrische Fall ist nur in dem Transportparameterbereich stabil, in dem kein Typ mit einfacher innerer Symmetrie existiert. Er ist in dem Bereich instabil, in dem mindestens ein Typ mit einfacher innerer Symmetrie existiert.

Außer der Stabilitätsgrenze mit verschwindender Determinante gibt es noch eine Stabilitätsgrenze, wenn die Determinante positiv ist und die Spur der (2,2)- Matrizen G_j , $j \in \{0,1,2,3\}$ verschwindet. Wenn die Spur und die Determinante positiv sind, gibt es ein Paar Eigenwerte mit positivem Realteil, oder es gibt zwei rein reelle positive Eigenwerte. D.h. es gibt einen instabilen Brenn- oder Knotenpunkt. Um einen instabilen Brenn- oder Knotenpunkt können Grenzzyklen auftreten, d.h. Oszillationen

des Systems. Für die Eigenwerte der Matrizen G_j gilt:

$$\lambda^2 - \text{Spur}\,(G_j)\,\lambda + \text{Det}\,(G_j) = 0 \qquad (4.2.16.)$$

Für die Spur gilt: $Sp_j = -(\phi + \alpha\Gamma_o + \vartheta_j + 2p_{jy})$ (4.2.17.)

wobei zusätzlich zu den bisherigen Definitionen für ϑ_j und p_{jy} noch $\vartheta_o = 1$ und $p_{oy} = 0$ eingeführt wird.

$$Sp_j = \frac{\gamma[(\varkappa-\alpha\tau)(\tau\chi^2-2\chi)-1-\gamma-\alpha]-\gamma\chi(1+\chi+\varkappa\chi^2)(\vartheta_j+2p_{jy})}{\gamma\chi(1+\chi+\varkappa\chi^2)} \qquad (18).$$

Für die flexiblen Parameter γ und χ gelten dieselben Stabilitätsgrenzbedingungen wie für das System ohne Transport. Nämlich Instabilität liegt vor wenn gilt: 1) $\tau < \varkappa/\alpha$

2) $\chi > (1+\sqrt{(\varkappa+\gamma+\gamma^2)/(\varkappa-2\gamma)})/\gamma$ (4.2.19.).

Während für den Flußparameter φ die Instabilitätsgrenzbedingungen für die verschiedenen Eigenräume j von den Transportparametern p_{jx} und p_{jy} abhängt. In Bezug auf den Eigenraum j des vollsymmetrischen st.-st. herrscht Instabilität, wenn gilt:

$$\varphi > \frac{(\vartheta_j+2p_{jy})(1+\chi+\varkappa\chi^2)\gamma\chi}{(\varkappa-\alpha\gamma)(\gamma\chi^2-2\chi)-1-\gamma-\alpha} \qquad (4.2.20.).$$

Der Ausdruck $\vartheta_j + 2p_{jy}$ ist für jedes $j \in \{0,1,2,3\}$ größer/gleich 1, so daß bei fest vorgegebenem φ p_{ix} und p_{iy} klein sein müssen, damit ein instabiler Brenn- oder Knotenpunkt möglich ist. Wenn aber z.B. γ zu groß ist, gibt es nur eine Art von Stabilitätsgrenzen: $\text{Det}_j = 0$. Bei negativer Determinante hat der vollsymmetrische st.-st. Sattelpunktcharakter.

Die Stabilitätsgrenze $\text{Spur}_j = 0$ ist im Transportparameterraum eine Gerade, die nur für den Bereich definiert ist, in dem die Determinante positiv ist, d.h. sie beginnt an der anderen Stabilitätsgrenze, falls sie überhaupt vorhanden ist.

Die Grenze zwischen Knoten- und Brennpunktcharakter wird durch die verschwindende Diskriminante bestimmt. Wenn die Diskriminante negativ ist, tritt ein Paar konjugiert komplexer Eigenwerte auf. Bei komplexen Eigenwerten ist der st.-st. ein Brennpunkt. Die Diskriminante ist:

$$D_j = \text{Spur}_j^2 - 4\,\text{Det}_j ,$$

$$D_j = (\phi_0 + \alpha\Gamma_0)^2 + 2(\phi_0 - \alpha\Gamma_0)(\vartheta_j - 2p_{jy}) + (\vartheta_j - 2p_{jy})^2 \qquad (4.2.21).$$

Die Diskriminante verschwindet, wenn gilt:

$$(\vartheta_j - 2p_{jy})_{12} = \alpha\Gamma_0 - \phi_0 \pm 2\sqrt{-\alpha\Gamma_0\phi_0} \qquad (4.2.22.).$$

Γ_0 ist auf jeden Fall positiv, so daß diese Grenzkurve nur dann reelle Lösungen für die Transportparameter besitzt, wenn $\phi_0 < 0$ gilt. Das ist nur dann möglich, wenn $\chi > (1+\sqrt{(\delta+\gamma+\gamma^2)/\delta})/\gamma$ (4.2.23.). Wenn p_{jy} größer ist als der Wert der Grenzgerade ist die Diskriminante positiv. Für die von Transportparametern freie Diskriminante D_0 gilt:

$$D_0 = (\phi_0 + \alpha\Gamma_0)^2 + 2(\phi_0 - \alpha\Gamma_0) + 1 \qquad (4.2.24.),$$

$$D_0 = \varphi^2(1+\gamma+\alpha+(\delta-\alpha\gamma)(2\chi-\gamma\chi^2))^2/\gamma^2\chi^2q^2 + 2\varphi(1+\gamma-\alpha+(\delta+\alpha\gamma)(2\chi-\gamma\chi^2))/(\gamma\chi q)+1 \qquad (4.2.25).$$

Diese Diskriminante ist dann negativ, wenn gilt: (4.2.26.)

$$\chi > (1+\sqrt{(\alpha+\gamma+\gamma^2)/(\alpha+\lambda\gamma)})/\gamma \quad \text{und außerdem:} \quad (4.2.27.)$$

$$\varphi < \frac{\gamma^2\chi^2q(\lambda-\gamma-1-\chi(\alpha+\lambda\gamma)(2-\gamma\chi))}{1+\gamma+\lambda+\chi(\alpha-\lambda\gamma)(2-\gamma\chi))^2} + 2\sqrt{\lambda(1+\gamma+\chi(\gamma\chi-2)(\gamma(1+\gamma)-\alpha(1+\gamma\chi(\gamma\chi-2))))}\,.$$

Diese Grenzbedingung für φ ist aber nur dann reell, wenn $\delta << 1$ ist, andernfalls reicht die Grenzbedingung für χ aus, damit die Diskriminante negativ wird. D.h. der vollsymmetrische st.-st. hat für einen großen χ-Wertebereich wenigstens in einem Eigenraum Brennpunktcharakter.

δ ist eine Funktion der Enzymgesamtkonzentration, so daß die Zellen, wenn die anderen Parameter es zulassen, über die Produktion oder Destruktion von Enzymen zwischen Oszillation und Nicht-Oszillation schalten können.

4.2.4. Stabilitätsgrenzen für st.-st. mit einfacher innerer Symmetrie.

Eine Stabilitätsgrenze für die Fälle mit einfacher innerer Symmetrie ist durch das Verschwinden der (4,4) -Determinante gegeben. Allgemein lautet die Teilmatrix:

$$\begin{pmatrix} \vartheta_m + \phi_0 & \Gamma_0 & \phi_l & \Gamma_l \\ \alpha\phi_0 & 2p_{my} + \alpha\Gamma_0 & \alpha\phi_l & \alpha\Gamma_l \\ \phi_l & \Gamma_l & \vartheta_n + \phi_0 & \Gamma_0 \\ \alpha\phi_l & \alpha\Gamma_l & \alpha\phi_0 & 2p_{ny} + \alpha\Gamma_0 \end{pmatrix} \qquad (4.2.28.).$$

wobei für die erste Teilmatrix jeweils gilt: m = 0, n = 1. Für die Ableitungen der Reaktion nach den Konzentrationen der Substanzen gilt:

$$\phi_0 = f_i + f_k \;;\quad \phi_l = f_i - f_k \;,\quad \Gamma_0 = g_i + g_k \;,\quad \Gamma_l = g_i - g_k$$

wobei für i und k die Indizes zu wählen sind, für die z.B. $f_i \neq f_k$ gilt.

Die Gleichung der Determinante lautet dann:

$$\begin{aligned} &2\{2[(1+\phi_0)(\vartheta_m+\vartheta_n) - 1 + 4(f_i f_k + p_{mx}\cdot p_{nx})]\, p_{my} p_{ny} \\ &+ \alpha\langle[2\alpha g_i g_k + \Gamma_0(p_{my}+p_{ny})]\,\vartheta_m\vartheta_n \\ &+ 2(f_i g_k + f_k g_i)(\vartheta_m p_{ny})\rangle\} = Det_{mn} \qquad (4.2.29.). \end{aligned}$$

Für die erste Teilmatrix lautet sie explizit:

$$2\alpha\langle[2\alpha g_i g_k + \Gamma_0 p_{ej}]\,\vartheta_e + 2(f_i g_k - f_k g_i)\, p_{ey}\rangle = Det_{oe} \qquad (4.2.30).$$

Für $g_i = g_k = \Gamma_0/2$ und $f_i = f_k = \phi_0/2$ geht sie in die Stabilitätsgrenzbedingung für den vollsymmetrischen Fall über, (4.2.12.):

$$\alpha\Gamma_0 < (\alpha\Gamma_0 + 2p_{ey})\,\vartheta_e + 2\phi_0 p_{ey} = Det_l$$

Die Stabilitätsgrenzkurven der st.-st. mit einfacher innerer Symmetrie, die sich aus der ersten Teilmatrix ergeben, haben dieselbe hyperbolische Form, wie die des vollsymmetrischen st.-st.:

$$p_{ey} = (-2\alpha g_i g_k \vartheta_e) \,/\, (2(f_i g_k + f_k g_i) + \Gamma_0\vartheta_e \qquad (4.2.31).$$

Mit den Asymptoten: für großes ϑ_e : $p_{ey} = (-2\alpha g_i g_k / \Gamma_0)$

und für großes p_{ly}: $\vartheta_e = (-2(f_i g_k + f_k g_i) / \Gamma_0)$

Diese Asymptoten sind aber keine Geraden, da die f_i, f_k usw. Funktionen der Lösungspunkte sind, und da diese ihrerseits von den Transportparametern abhängig sind. Bei genügend großen Transportparametern liegt diese Stabilitätsgrenzkurve für einfach symmetrische st.-st. im Bereich der Nichtexistenz dieser Punkte.

Die auf jeden Fall relevante Stabilitätsgrenzkurve der st.-st. mit einfacher innerer Symmetrie ist diejenige, die sich aus der zweiten Teilmatrix ergibt. Sie enthält Terme, in denen die Transportparameter in höherer Ordnung auftreten. Sie kann im untersuchten Parameterbereich in mehrere Äste zerfallen. Auch hier tritt zusätzlich durch die Abhängigkeit der f_i, g_k von den Lösungen der Punkte eine weitere Abhängigkeit von den Transportparametern auf. Die Grenzkurven für die Stabilität wurden mit einem numerischen Verfahren zur Kurvenverfolgung bestimmt.

4.2.5. Exemplarische Gebiete im Parameterraum.

Da für die Punkte ohne innere Symmetrie nicht einmal die Lösungen algebraisch angebbar sind, läßt sich nicht sagen, ob die Existenzgrenzen dieser Lösungen mit den Stabilitätsgrenzen der Punkte mit innerer Symmetrie übereinstimmen. Numerische Berechnungen in der Nähe einer Stabilitätsgrenze legen diesen Schluß allerdings nahe. Wegen des Verlaufs dieser Stabilitätsgrenzen, die zum Teil aus zwei Ästen bestehen, sind die Gebiete der Stabilität der st.-st. mit innerer Symmetrie nicht unbedingt zusammenhängend. Und das Auftreten von fünf Quadrupeln st.-st. ohne innere Symmetrie in einem Gebiet, in dem alle st.-st. mit einfacher innerer Symmetrie stabil sind, ist nicht durchsichtig.

Ohne Berücksichtigung möglicher weiterer Stabilitätsgrenzen, die aus dem Verschwinden der anderen Koeffizienten des charakteristischen Polynoms gewonnen werden könnten, und Grenzen für paarweise das Vorzeichen wechselnde Eigenwerte angeben, lassen sich aus den Stabilitätsgrenzen

für die verschwindenden Determinanten 27 Gebiete im Transportparameterraum gewinnen. Da die Existenzgrenzen für die st.-st. mit einfacher innerer Symmetrie mit den Stabilitätsgrenzen des vollsymmetrischen st.-st. übereinstimmen, müssen nur drei verschiedene Möglichkeiten: Inexistenz, Instabilität und Stabilität für die drei Typen mit einfacher innerer Symmetrie betrachtet werden.

Es lassen sich z.B. drei Grafiken für die drei Möglichkeiten von Typ 2 mit Typ 1- Variablen gewinnen, die jeweils neun Gebiete enthalten. Da sich aber die drei Typen im wesentlichen gleichartig verhalten müssen, reicht die exemplarische Untersuchung von zehn Fällen, nämlich der Kombination mit Wiederholung über 3 Elemente anstatt der Variation über 3 Elemente.

In den beiden Grafiken mit einem existierenden st.-st. vom Typ 2 gibt es bei genauerem Hinsehen eine Stabilitätsgrenze für diesen Typ. In der einen Grafik ist für den größten Bereich der st.-st. vom Typ 2 instabil, während er in der anderen Grafik stabil ist.

Den Gebieten im Parameterraum lassen sich Zahlentupel zuordnen. Für die drei Möglichkeiten: Nichtexistenz, Instabilität und Stabilität werden die Werte 0,1,2 gewählt. Die Stelle im Zahlentripel gibt hier das Verhalten des jeweiligen Typs mit einfacher innerer Symmetrie an. So ist das Gebiet, in dem alle st.-st. mit einfacher innerer Symmetrie stabil sind, durch (2,2,2) charakterisiert, während das Gebiet, in dem nur der vollsymmetrische st.-st. stabil ist, mit (0,0,0) charakerisierbar ist.

Drei wichtige Fälle im Bezug auf das Verhalten der st.-st. mit innerer Symmetrie sind grundsätzlich zu unterscheiden:

1. Das Gebiet, in dem der vollsymmetrische st.-st. stabil ist und kein weiterer st.-st. mit innerer Symmetrie existiert.
2. Die Gebiete, in denen kein st.-st. mit innerer Symmetrie stabil ist. (diese Gebiete liegen wie eine Insel zwischen den anderen beiden Fällen).
3. Die Gebiete in denen der vollsymmetrische st.-st. instabil ist und mindestens ein weiterer st.-st. mit innerer Symmetrie stabil ist.

Die Parameter des Reaktionssystems ($\varphi, \chi, \gamma, \delta, \varkappa$) beeinflussen als Scharparameter die Lage der Grenzkurven. So wird z.B. durch die Zuflußparameter φ und χ die Lage der Asymptoten stark beeinflußt. Je größer φ, der Zufluß der Substanz y ist, um so kleiner ist das Gebiet des vollsymmetrischen st.-st. Dagegen je größer χ, die Differenz der Zuflüsse von Substanz x und y ist, um so kleiner ist das Gebiet der einfach symmetrischen st.-st.. D.h. eine Vergrößerung des Zuflusses φ bei festen Permeationen kann das System vom vollsymmetrischen Muster in ein weniger symmetrisches überführen. Eine Erhöhung von γ, der Gesamtenzymkonzentration verändert zwar die Lage der Polstellen kaum, vergrößert aber das Gebiet des vollsymmetrischen Musters.

Zu den Abbildungen: Abb. 4.2.1.1. bis Abb. 4.2.3.3. .

Existenz- und Stabilitätsgrenzen der steady states mit einfacher innerer Symmetrie. Die Existenzgrenzen der st.-st. mit einf. inn. Symm. (1,j) , $j \in \{1,2,3\}$ sind identisch mit den Stabilitätsgrenzen des vollsymm. st.-st. (o) (Gleich. 4.2.15.). Die Stabilitätsgrenzen werden durch den charakteristischen Tupel des st.-st. (1) entsprechend Kap. 3.7. und 5.2.1. und die verschwindende k. Teildeterminante d.h. mit ((1);k) bezeichnet. Die Gebiete des Parameterraums werden entsprechend Kap. 4.2.5. mit den drei Möglichkeiten der drei st.-st.-Typen mit einf. inn. Symm. bezeichnet. Jeweils 2 plots werden in einer schematischen Grafik zusammengefaßt.
Es gilt für die Reaktionsparameter: $(\alpha , \varkappa , \varphi , \chi , \gamma) = (1,1,8o,2o,1.25)$.
Für die Transportparameter in Abb. 4.2.1.i. $(p_{1x} , p_{1y}) = (o.2,1.o)$
in Abb. 4.2.2.i. $= (o.2,1.5)$ und in Abb. 4.2.3.i. $= (o.1,4.o)$.
Zur Abb. 4.2.1.i. wird noch ein anderes Beispiel mit genauerem Ausschnitt angegeben : $(p_{1x} , p_{1y}) = (o.o1,o.2)$, Abb. 4.2.1.2.a .
Die Existenzgrenzkurve für (1,2) wird mit 1. , die für (1,3) mit 2. ,
die Stabilitätsgrenzkurven für (1,2) mit 3.1./3.2. ,
die für (1,3) mit 4.1./4.2. , die für (1,1) mit 5. bezeichnet.
Die Kurve 3.2. , d.h. der zweite Ast der Stabilitätsgrenze von (1,2) wird in der Abb. 4.2.2.2. nicht numerisch berechnet, ein Punkt dieser Kurve liegt zwischen $p_{2y} = 2.34637$ und 2.34638 bei $p_{2x} = o.4$
Die "zweiten" Äste der Stabilitätsgrenzen liegen sehr nahe an den Existenzgrenzen. Zu ihrer Berechnung müssen die Konzentrationswerte berechnet werden,diese werden jenseits der Existenzgrenze komplex, (Abb. 4.1.1.).
In der Schemazeichnung wird diese Nähe ignoriert, sie kommt in den übereinanderliegenden plots zu Ausdruck.

Abb. 4.2.1.1.
Existenzgrenzen der steady states (1,2) und (1,3). (1,1) inexistent.

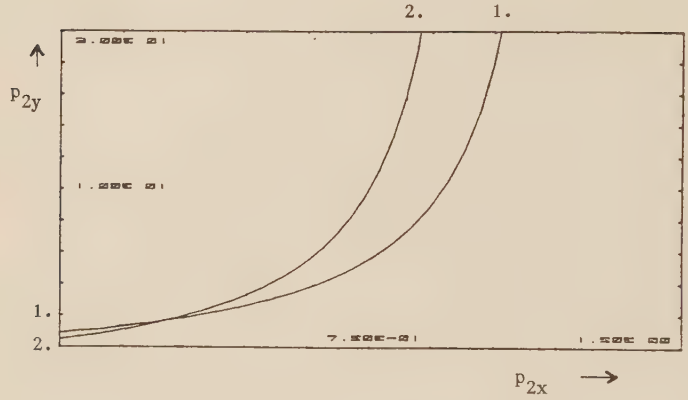
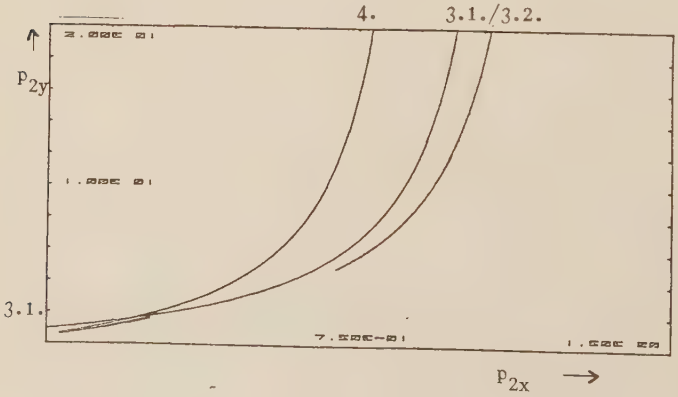


Abb. 4.2.1.2.
Stabilitätsgrenzen der steady states (1,2) und (1,3).



Erklärender Text Seite 90, grafische Zusammenfassung Seite 92.

Abb. 4.2.1.2.a

Stabilitätsgrenzen der steady states (1,2) und (1,3).

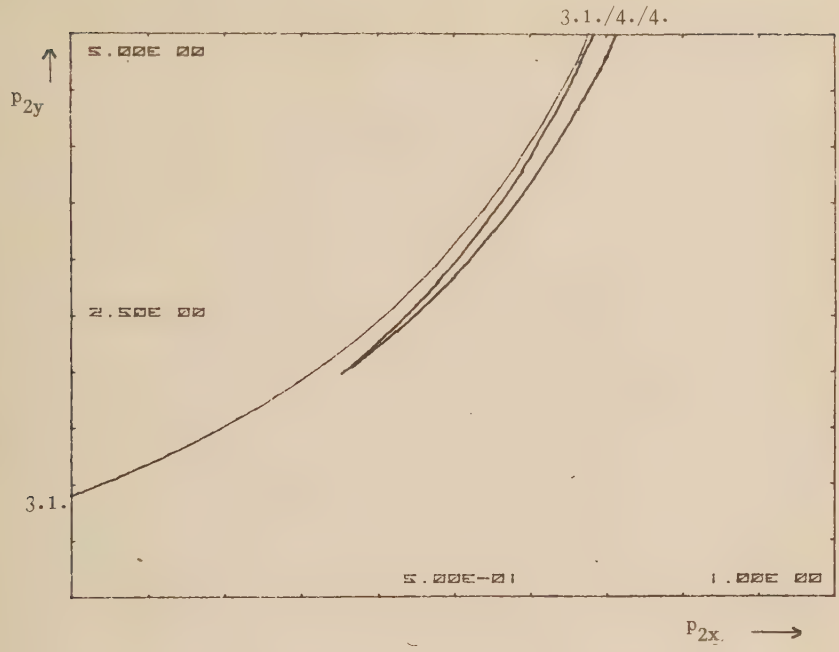
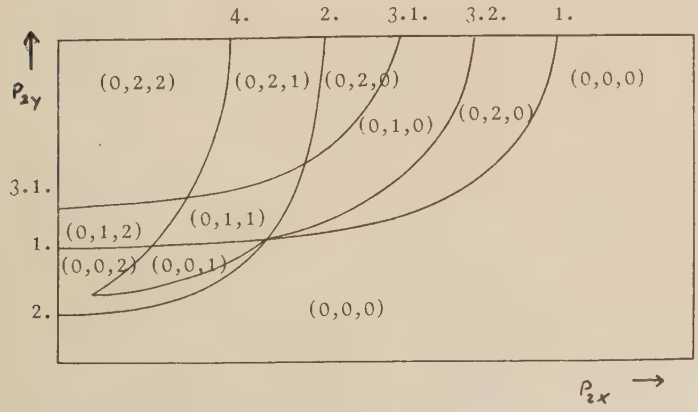


Abb. 4.2.1.3.

Schematische Grafik der Gebiete des Parameterraums. (1,1) inexistent.



Erklärender Text Seite 90.

Abb. 4.2.2.1.
Existenzgrenzen der steady states (1,2) und (1,3); (1,1) instabil.

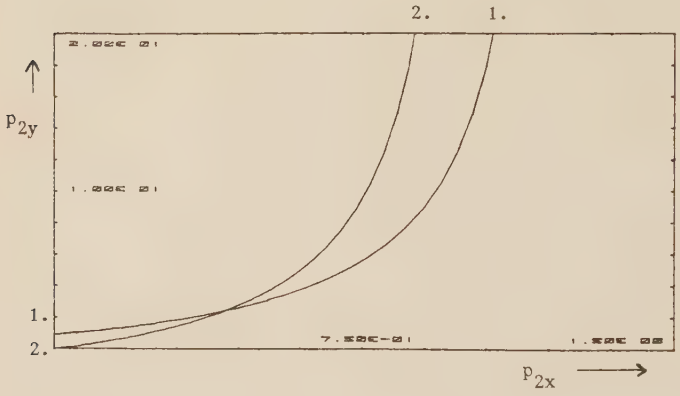
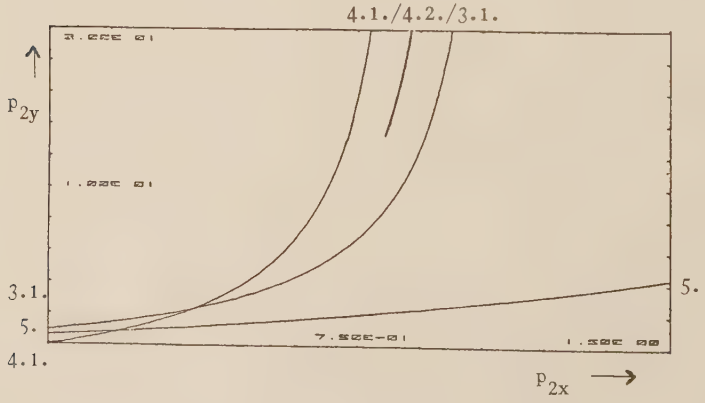


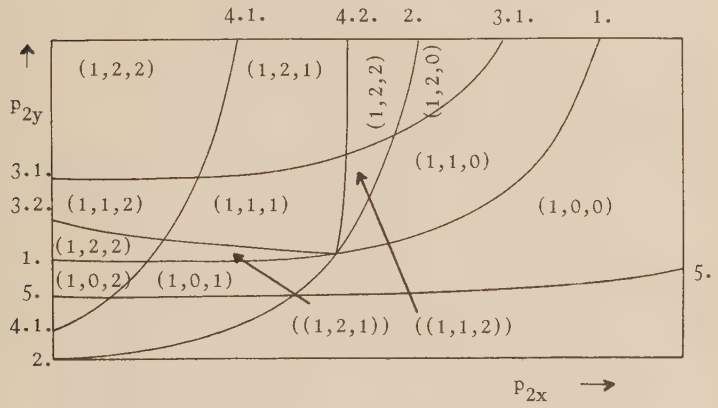
Abb. 4.2.2.2.
Stabilitätsgrenzen der steady states (1,2) , (1,3) und (1,1).



Erklärender Text Seite 90, grafische Zusammenfassung Seite 94.

Abb. 4.2.2.3.

Schematische Grafik der Gebiete des Parameterraums. (1,1) instabil.



Erklärender Text Seite 90.

Abb. 4.2.3.1.
Existenzgrenzen der steady states (1,2) und (1,3); (1,1) stabil.

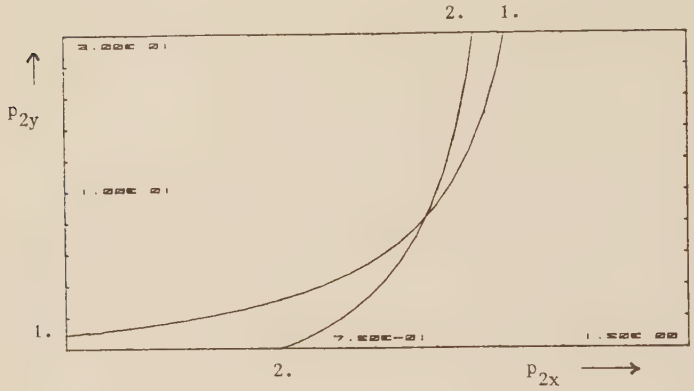
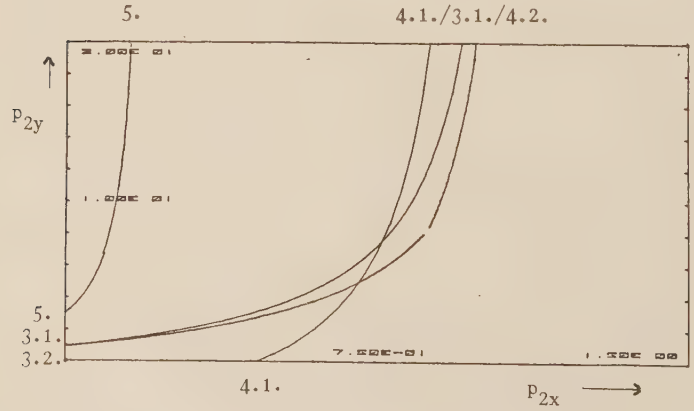


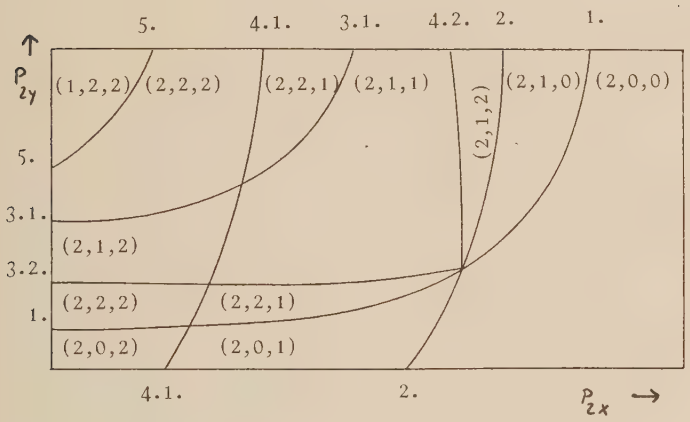
Abb. 4.2.3.2.
Stabilitätsgrenzen der steady states (1,2) , (1,3) und (1,1).



Erklärender Text Seite 90, grafische Zusammenfassung Seite 96.

Abb. 4.2.3.3.

Schematische Grafik der Gebiete des Parameterraums. (1,1) stabil im größten Bereich.



Erklärender Text Seite 90.

5. Numerischer Zugang.

5.1. Ein numerisches Verfahren zur Bestimmung vieler steady states.

Wie aus den gruppentheoretischen Überlegungen hervorgeht, sind unterschiedliche Typen von st.-st. als Lösungen des Gleichungssystems in größerer Anzahl möglich. Die algebraischen Untersuchungen des Gleichungssystems zeigen, daß sehr viele Lösungen zu erwarten sind.

In Systemen mit einem oder wenigen st.-st. lassen sich diese mit Hilfe lokaler numerischer Optimierungsverfahren bestimmen, z. B. mit dem Newton-Verfahren. Diese Verfahren setzen voraus, daß der Startpunkt in einer gewissen Umgebung des st.-st. liegt. Bei einer größeren Anzahl von st.-st. in einem gegebenen Bereich des Phasenraums müßten solche lokalen Verfahren mit mehrfachen Starts - Multistartverfahren - angewandt werden. Je höher die Dimension, je zahlreicher die st.-st. oder je dichter sie beieinander liegen, um so ineffektiver wird das Multistartverfahren.

Die Suche nach sämtlichen Nullstellen eines algebraischen GlS oder nach den Singularitäten eines DGlS oder bei ähnlichen Problemen, wie die Suche nach Maxima und Minima, oder nach dem globalen Maximum eines GlS, läßt sich nicht nur lokal sondern auch global betreiben. Eine Methode ist das globale Trajektorien-Verfahren von Branin (Branin 1970). Ebenso wie die Isoklinen - z. B. speziell die Nullklinen -, die zum Richtungsfeld eines DGlS im 2-dimensionalen Raum gehören, durch jeden st.-st. des Systems gehen, verhalten sich die Branin-Trajektorien bezüglich eines GlS beliebiger Dimension.

Jedes DGlS ist durch Nullsetzen der linken Seite in ein algebraisches GlS überführbar; dessen Lösungsmenge, Nullstellenmenge, entspricht den st.-st.. Wenn die Cauchy-Lipschitz-Bedingungen gelten, d. h. das GlS

in allen regulären Punkten stetig und stetig differenzierbar ist, folgt:

1) für jeden regulären Punkt läßt sich ein und nur ein Linienelement, Tangentenstück an die Integralkurve, bestimmen;

2) für singuläre Punkte ist das Linienelement unbestimmt.

In einer beschränkten Umgebung des isolierten singulären Punktes treten Linienelemente aller Richtungen auf. Jedes Linienelement läßt sich stetig mit einem Linienelement gleicher Richtung verbinden.

Die Branin-Trajektorie ist eine eindimensionale Mannigfaltigkeit, zu der sämtliche Punkte des Phasenraums gehören, deren Linienelemente die gleiche Richtung besitzen, d. h. deren Linienelemente parallel sind. Auf jeder Branin-Trajektorie müssen damit sämtliche st.-st. liegen. Eine Branin-Trajektorie muß aber nicht unbedingt zusammenhängend sein. Sie kann aus Zweigen bestehen. Wenn nur ein begrenztes Gebiet des Phasenraums untersucht wird, werden selten alle st.-st. in diesem Gebiet auf dem selben "Zweig" einer Branin-Trajektorie liegen, so daß auch hier eine Multistartverfahren notwendig wird, allerdings mit dem Vorteil, daß bei einem globalen Verfahren der Startpunkt nicht in der lokalen Umgebung eines st.-st. liegen muß.

Eine Branin-Trajektorie ist konstruierbar. Beginnend von einem beliebigen Startpunkt des Phasenraums $\underline{c}_o$ läßt sich dort das Linienelement, der Geschwindigkeitsvektor des DGlS $\underline{f}_o = \underline{f}(\underline{c}_o)$ bestimmen. Alle Punkte $\underline{c}$ mit der Eigenschaft $\underline{f}(\underline{c}) = w \cdot \underline{f}_o$, mit w als berechenbarem Skalar, bilden dann die eindimensionale Mannigfaltigkeit $\{\underline{c}_{fo}\}$. Eine Möglichkeit eine Branin-Trajektorie zu konstruieren könnte darin bestehen, daß ein **Kurvenverfolger** alle Punkte gleicher Richtung miteinander verbindet; wegen der Stetigkeit der Ableitung können die in der Nähe einer Branin-Trajektorie (BT) liegenden BT nur geringe Richtungsabweichungen besitzen. In der Nähe eines st.-st. wird auf ein lokales Verfahren umgeschaltet. Die Nähe eines st.-st. ist dadurch ausgezeichnet, daß in der Umgebung eines st.-st.

alle Richtungen vorhanden sind, wodurch z. B. ein Kurvenverfolger mit Schrittweitensteuerung die Schrittweite vermindern muß. Nach Durchschreiten des st.-st. ändert der Skalar w sein Vorzeichen. Eine andere Möglichkeit besteht darin, für die BT ein DGlS zu finden. Das ist der Ansatz von Branin selbst.

Eine Branin-Trajektorie läßt sich durch die Lösung des folgenden gewöhnlichen DGlS angeben: $\underline{c}_s = (-1)^k \cdot \text{Adj}\ (\underline{\underline{J}}) \cdot \underline{f}$,

hierbei sind: $\underline{c}_s$ ist die Ableitung bezüglich des natürlichen Kurvenparameters s (keine Zeitableitung).

k 1,2,3,... ist die fortlaufende Nummerierung der st.-st. entlang einer BT.

Adj ($\underline{\underline{J}}$) ist die adjungierte Matrix zur Jacobi-Matrix.

$$\underline{\underline{J}} = \left(\frac{\partial f_i}{\partial c_j} \right)$$

Punkte, an denen $\underline{f} \neq \underline{o}$ aber Adj ($\underline{\underline{J}}$) = o ist, werden externe Singularitäten genannt.

Externe Singulariäten sind singuläre Punkte des Branin-DGlS, ohne singuläre Punkte des zu untersuchenden DGlS zu sein. Zur Unterscheidung der essentiellen singulären Punkte, d. h. der des zu untersuchenden Systems, von den externen dient die Eigenwertanalyse der sogenannten sekundären Jacobi-Matrix (JM), das ist die JM des Branin-DGlS. Wird das Branin-DGlS statt auf die Bogenlänge s, als Kurvenparameter, wie das ursprüngliche DGlS auf die Zeit t als Kurvenparameter bezogen, so lautet das Branin-DGlS

$\underline{c}_t = - \underline{\underline{J}}_p^{-1} \cdot \underline{f}\ (\underline{c})$.

Hierbei ist $\underline{\underline{J}}_p^{-1}$ die Inverse der Jacobi-Matrix des ursprünglichen, primären DGlS: $\underline{\underline{J}}_p^{-1} = \text{Adj}\ (\underline{\underline{J}}_p) / \text{Det}\ (\underline{\underline{J}}_p)$.

Beide Darstellungen der BT sind äquivalent und stimmen bis auf einen normierenden Faktor $(1/\text{Det}\ (\underline{\underline{J}}_p))$ überein. Für die JM des Branin-DGlS, die

sekundäre JM $\underline{\underline{J}}_s$ gilt: $\underline{\underline{J}}_s = (\partial (- \underline{\underline{J}}_p^{-1} \cdot \underline{f}(\underline{c})) / \partial \underline{c})$

$$\underline{\underline{J}}_s = - \left(\frac{\partial \underline{\underline{J}}_p^{-1}}{\partial \underline{c}} \cdot \underline{f}(\underline{c}) + \underline{\underline{J}}_p^{-1} \cdot \frac{\partial \underline{f}}{\partial \underline{c}} \right)$$

$$\underline{\underline{J}}_s = - \left(\frac{\partial \underline{\underline{J}}_p^{-1}}{\partial \underline{c}} \cdot \underline{f}(\underline{c}) + \underline{\underline{J}}_p^{-1} \cdot \underline{J}_p \right)$$

$$\underline{\underline{J}}_s = - \left(\frac{\partial \underline{\underline{J}}_p^{-1}}{\partial \underline{c}} \cdot \underline{f}(\underline{c}) + \underline{\underline{E}} \right)$$

Für essentielle stationäre Punkte mit $\underline{f}(\underline{c}) = \underline{o}$ wird $\underline{\underline{J}}_s = - \underline{\underline{E}}$, diese Punkte haben in Bezug auf das Branin-DGlS den Charakter von Knotenpunkten. Für die externen Singularitäten wird $\underline{\underline{J}}_p^{-1} = \underline{\underline{o}}$. Branin gibt an, daß er nur externe Singulatitäten mit Sattel- oder Wirbelcharakter gefunden hat, aber keine Brennpunkte. Sattel- und Wirbelpunkte machten insofern besondere Schwierigkeiten, als durch sie Gebiete der Nicht-Konvergenz entstehen, d.h. Gebiete, in die eine BT nicht hineinlaufen kann (Sattelpunkte), oder in denen geschlossene Trajektorien auftreten (Umgebung von Wirbelpunkten). Die zu suchenden Singularitäten in diesen Gebieten würden vielleicht von Nachbartrajektorien gefunden. Eine Schwierigkeit stellt grundsätzlich das Singulärwerden der JM dar, ob in den externen isolierten Singularitäten oder sogar auf einer ein- oder mehrdimensionalen Mannigfaltigkeit. Wenn solche Singularitäten beim Verfolgen einer BT auftreten, muß ein neuer Start versucht werden. Jeder neue Start wurde in der Nähe eines gefundenen st.-st. mit grob orthogonaler Richtung des Linienelements der neuen BT zur Richtung des Linienelements einer durchlaufenen BT gemacht. Das Verfahren lieferte ergänzt durch gruppentheoretische Betrachtungen bis zu 31 st.-st. in einem Bereich des Phasenraums.

5.2. Die gefundenen steady states.

5.2.1. Charakterisierung und Klassifizierung von vielen st.-st. .

Für die Reaktionsparameter:

$(\alpha, \varkappa, \varphi, \chi, \gamma) = (1, 1, 8o, 2o, 1.25)$ und die beiden Sätze von Transportparametern mit $(p_{hx}, p_{hy}, p_{vx}, p_{vy}) =:$ 1. $(o.1, 4.o, o.2, 8.o)$ und 2. $(o.1, 4.o, o.1, 4.o)$ lassen sich die mit Hilfe der numerischen Berechnung und der gruppentheoretischen Komplettierung gefundenen Lösungen schematisch durch die Tabellen (Tab. 5.2.1. und Tab. 5.2.2.) und numerisch durch Tab. 5.2.3. und 5.2.4. darstellen. Aus den Parametern lassen sich die abgeleiteten Größen berechnen. Diese Größen sind in 3.3. und 4.1.2. eingeführt und bedeuten:

$\beta_j = -2p_{jy}/\alpha$; $\vartheta_j = 1+2p_{jx}$; $\delta_j = -\beta_j / \vartheta_j$. Im 3-dim. System gilt: $x_j = \delta_j y_j$.

	1.	2.
(β_j) =	$(-8, -16, -24)$,	$(-8, -8, -16)$,
(ϑ_j) =	$(1.2, 1.4, 1.6)$,	$(1.2, 1.2, 1.4)$,
(δ_j) =	$(6.6, 11.4, 15)$,	$(6.6, 6.6, 11.4)$,

$j \in \{1,2,3\} \quad \hat{=} \quad \{h,v,d\}$.

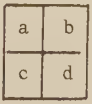
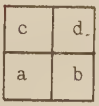
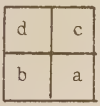
Jedes Muster bleibt unter der angegebenen Standgruppe (SG) invariant und wird durch die, durch ihren Index angegebene SO aus dem unter e stehenden Muster erzeugt. Die SG wird für das 4-dim. Koordinaten-System (KS) angegeben. Die eingefügten y_j geben die Richtung im 3-dim. KS an.

Die Symbole $(\oplus, \oslash, \bigcirc, \odot, \ominus, \Phi, \cdot)$ bedeuten die Größensorten der berechneten Konzentrationen der Substanz x . Gleiche Symbole in verschiedenen Bahnen bedeuten nicht denselben Zahlenwert. Es gilt: $(\oplus \gtrsim \oslash \gtrsim \bigcirc > \odot \gtrsim \ominus \gtrsim \Phi > \cdot)$. Die Zahlenwerte in den Tabellen sind auf zwei Stellen aufgerundet.

Die SO der Gruppe D_4 sind zum einen die SO der Gruppe D_2 , hier als UG D_{2m} , und dazu die SO, der aus dieser UG durch Multiplikation mit

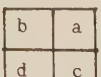
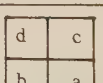
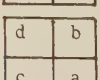
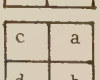
Tab. 5.2.1.

Bahnen der gefundenen Muster bei D_2-Symmetrie des Zellaggregats.

Index der SO der Bahn			e	v	h	d
lfd Nr.	charakt. Tupel	SG				
1	(o)	D_2				
2	(1,1) (y_h)	C_{2v}				
3	(1,2) (y_v)	C_{2h}				
4	(1,3) (y_d)	C_{2d}				
5	(2,2)	E				
6	(2,1)	E				
7	(2,1,1)	E				
8	(2,1,2)	E				
9	(2,1,3)	E				
allgemeines Muster		E				

Tab. 5.2.2.

Bahnen der gefundenen Muster bei D_4-Symmetrie des Zellaggregats.

Index der SO der Bahn (der UG D_{2m})			e	v	h	d	
lfd Nr.	charakt. Tupel	SG					Bez. zu D_2
1	(o)	D_4					1
2	(1,3)	D_{2d}					4
3	(2,3)	C_{2v}					2 (1,1)
		C_{2h}					3 („C_4") (1,2)
4	(2,2)	C_{2d1} C_{2d2}					5
5	(2,1)	C_{2d1} C_{2d2}					6
6	(2,1,3)	C_{2d1} C_{2d2}					9
7	(3,1)	E					8 (2,1,2)
							7 („C_4") (2,1,1)
allgemeines Muster		E					
							(„C_4")

Tab. 5.2.3.

Muster mit D_2 Symmetrie (für den 1. Parametersatz) .

	4-dimensionales KS		3-dimensionales KS	
	x-Variable	y-Variable	x-Variable	y-Variable
1	2o.o	17.54	o.o	o.o
2	38.75	23.21	37.5	5.62
	1.24	17.58		
3	38.7	21.68	37.41	3.27
	1.29	18.4o		
4	38.64	2o.16	37.28	2.48
	1.36	17.68		
5	24.9	2o.25	11.91	1.78
	27.o	2o.15	11.68	1.o2
	26.77	19.38	- 13.78	- o.92
	1.31	17.44		
6	6o.52	14.4	28.15	4.22
	7.62	1o.4	26.46	2.31
	5.93	8.5	26.43	1.76
	5.91	7.9		
7	54.49	17.1	15.99	2.39
	1.5o	13.o	26.26	2.29
	11.77	12.9	26.71	1.78
	12.23	12.4		
8	56.34	16.85	28.o	4.2
	11.65	13.5	17.88	1.56
	1.53	1o.86	26.81	1.78
	1o.46	11.o9		

9	57.4	16.79	28.74	4.3
	11.3	13.15	27.19	2.37
	9.7	11.22	18.89	1.26
	1.4	1o.1		

z.B. der Drehung C_4 erzeugten Nebenklassenelemente. In Nr. 3 und 7 wird durch die SO der "C_4-Nebenklasse" eine zweite Reihe von Mustern erzeugt (Teilbahn). Für die Muster Nr. 4 , 5 und 6 ist C_{2d1} SG zu den unter e und d stehenden Mustern, bzw C_{2d2} für h und v . Die charakteristischen Zahlentupel geben Auskunft über den Verlauf der Bahnen im 3-dimensionalen Raum entsprechend 3.7. :

1. Potenz der Ordnung der Bahn ;

2. Lage der Bahn (bei 1. = 1 auf welcher Achse

= 2 durch welchen Oktanten) ;

3. Lage der in Richtung der Achsen verschobenen Tetraederbahnen (Verschiebung zu welcher Achse).

Für den Fall mit ungleichen Permeationen in den beiden Membranen (D_2 Fall) wurden 9 Bahnen beim Rechnen im 8-dimensionalen Gleichungssystem gefunden. Für den D_4-Fall wurden 7 Bahnen gefunden. Die Gesamtmenge der Muster ist in beiden Fällen 27 gewesen.

Auch den Bahnen des D_4-Falls lassen sich die 9 Bahnen des D_2-Falls zuordnen. Der D_4-Fall läßt sich als Spezialfall des D_2-Falls betrachten. Die D_2-Bahn-Nummern sollen die Muster charakterisieren. Und die Indizes der SO der Bahnen $i \in \{e, v, h, d\}$ sollen einfach mit $i \in \{1, 2, 3, 4\}$ bezeichnet werden. So daß das Muster der 6. Bahn des D_4-Falls mit (9,3) bezeichnet wird.

Tab. 5.2.4.

Muster mit D_4- Symmetrie.

(Bahn-Nr. entsprechend D_4)				
	4-dimensionales KS		3-dimensionales KS	
	x-Variable	y-Variable	x-Variable	y-Variable
1	2o.o	17.54	o.o	o.o
2	38.7	21.68	37.41	3.27
	1.29	18.4o		
3	38.75	23.21	37.5	5.62
	1.24	17.58		
4	26.4	2o.76	12.56	1.88
	26.15	19.95	12.56	1.88
	26.15	19.95	-12.31	- 1.o7
	1.27	16.99		
5	64.6	15.57	3o.58	4.58
	5.96	8.53	3o.58	4.58
	5.96	8.53	28.o7	2.45
	3.44	6.4		
6	63.47	16.37	3o.79	4.62
	7.32	9.54	3o.79	4.62
	7.32	9.54	25.36	2.22
	1.89	7.19		
7	61.39	17.19	3o.83	4.62
	9.44	11.21	22.97	3.44
	1.58	1o.o3	28.97	2.53
	7.58	9.12		

Die Zahlenwerte zeigen, daß die x-Variablen wesentlich größere Abweichungen in den einzelnen Kompartementen besitzen als die y-Variablen, daß außerdem das Kompartement mit dem niedrigsten x - oder y-Wert nicht übereinstimmen muß.

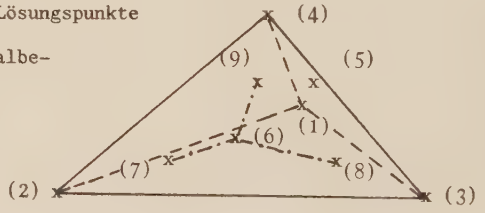
Durch eine Rechnung im 3-dimensionalen System wurde noch eine 1o. Bahn für den D_2-Fall mit den folgenden Werten gefunden:

	x-Variable	y-Variable
1o	38.1	5.76
	38.3	3.36
	38.4	2.56

Wird im 3-dimensionalen Raum von jeder Bahn ein Lösungspunkt dargestellt, d. h. ein Fundamentalbereich betrachtet, so läßt sich das z. B. durch eine Projektion auf eine Fläche darstellen, die durch 3 Punkte mit einfacher innerer Symmetrie geht.

Abb. 5.2.1.

Projektion der Lösungspunkte eines Fundamentalbereichs auf eine Oktaederfläche.



Der vollsymmetrische st.-st. (1) bildet den Ursprung des Koordinatensystems, die 3 st.-st. mit einfacher innerer Symmetrie (2), (3), (4), liegen auf den Achsen. Die Bahn des st.-st. (5) geht durch den 7. Oktanten,(5) liegt in Bezug auf die Ebene (2), (3), (4) hinter dem Ursprung (1). Die 4 st.-st. (6), (7), (8), (9) haben Bahnen, die durch den 1. Oktanten gehen. Die Tetraederbahnen der Punkte (7), (8), (9) liegen in den Winkeln

der Tetraeder-Bahn des Punktes (6).

Die im 3-dimensionalen Gleichungssystem gefundene Bahn (10) besitzt einen größeren Abstand zum Ursprung (1) als die Bahnen (6), (7), (8), (9).

Bei der D_4 Symmetrie liegen die Punkte der Tetraederbahnen (5), (6), (9) genau auf den Ebenen, die die Winkelhalbierenden d_1, d_2 mit der z-Achse bilden, und die Hexaederbahn der zusammengehörenden Punkte (7) und (8) ist symmetrisch zu diesen beiden Ebenen.

Für die beiden bisher angegebenen Parametersätze sind alle st.-st. mit einfacher innerer Symmetrie und nur diese stabil, so daß die Muster ohne innere Symmetrie bei dieser Parameterwahl vor allem theoretisch von Bedeutung sind.

5.2.2. Stabile st.-st. ohne innere Symmetrie.

5.2.2.1. Die Gebiete des Parameterraums mit stabilen st.-st. ohne innere Symmetrie.

Mit der in 4.2.4. eingeführten Charakterisierung der Gebiete des Parameterrraums durch Zahlentripel lassen sich die numerischen Ergebnisse einordnen. Die beiden bisher angegebenen Parametersätze gehören zu dem Gebiet (2,2,2). Für dieses Gebiet wurden mit der numerischen Methode die meisten st.-st. überhaupt gefunden.

Das Gebiet, in dem kein st.-st. mit einfacher innerer Symmetrie existiert, und in dem der vollsymmetrische st.-st. stabil ist, nämlich (o,o,o) enthält nur den vollsymmetrischen st.-st. Es wurden keine st.-st. ohne innere Symmetrie numerisch gefunden. Die numerische Methode gestattet allerdings keine strenge Vollständigkeitsaussage.

Da die 3 st.-st.-Typen mit einfacher innerer Symmetrie gleichwertig sind, lassen sich alle Gebiete, deren Zahlentripel durch Permutationen ineinander überführbar sind, zu einem gemeinsamen Fall zusammmenfassen, z. B. (1,o,o) mit (o,1,o) und (o,o,1).

Die numerischen Ergebnisse haben in Bezug auf die Existenz der st.-st. ohne innere Symmetrie die in 4.2.4. angegebene Zusammenfassung auf 3 wichtige Hauptfälle bestätigt, (Tab. 5.2.5.).

Zu dem Fall 2 - Gebiet ohne Stabilität für st.-st. mit innerer Symmetrie - gehören die 7 Gebiete, die durch die Permutationen der Tripel (1,o,o), (1,1,o) und (1,1,1) charakterisierbar sind. Für diesen Fall wurde ein stabiler st.-st. ohne innere Symmetrie numerisch gefunden. Die Ordnung der Bahn dieses st.-st. ist 4. Für diesen Fall existieren mindestens 7 st.-st., nämlich 4 stabile und mindestens 3 instabile (1,o,o). Ein Beispiel mit 9 st.-st. wird unten vorgestellt.

Tab. 5.2.5.

Die verschiedenen Fälle der Gebiete im Parameterraum und das Verhalten der st.-st. ohne innere Symmetrie.

Fall	Verhalten der Typen mit innerer Symmetrie	Verhalten der gefundenen Typen ohne innere Symmetrie	Beispiel aus dem Gebiet
1	vollsymmetrischer stabil	nicht gefunden	(o,o,o)
2	keiner stabil	ein Typ gefunden, stabil	(o,1,1)
3	mindestens ein Typ mit einfacher innerer Symmetrie stabil	z.B. 3 Typen gefunden, einer stabil, zwei instabil	(1,2,2)
(Sonderfall zu 3)	alle Typen mit einfacher innerer Symmetrie stabil	6 Typen gefunden, alle instabil	(2,2,2)

Zu dem Fall 3 - Gebiete mit mindestens einem stabilen st.-st. mit einfacher innerer Symmetrie - gehöhrt das Gebiet (2,2,2); aber auch ein Gebiet, in dem ein st.-st. ohne innere Symmetrie stabil ist, neben einem instabilen. Ein Beispiel mit 19 st.-st. wird unten vorgestellt.

5.2.2.2. Beispiele für Gebiete mit stabilen st.-st. ohne innere Symmetrie.

Zu dem Fall 2 gehört das Gebiet (o,1,1). ein Parametersatz, für den es einen stabilen st.-st. ohne innere Symmetrie gibt, ist der folgende:

$(\alpha, \beta, \varphi, \chi, \gamma) = (1{,}1{,}8o,\ 2o,\ 1.25)$,

$(P_{hx}, P_{hy}, P_{vx}, P_{vy}) = (o.o1,\ o.o7,\ o.5,\ 3.o)$.

Daraus lassen sich die folgenden Größen berechnen:

$(\beta_j) = (-o.14,\ -6,\ -6.14)$; $j \in \{1, 2, 3\}$,

$(\vartheta_j) = (1.oo2,\ 2.o,\ 2.oo2)$,

$(\delta_j) = (o.137,\ 3,\ 3.o3)$.

Tab. 5.2.6.

Beispiel für das Gebiet (o,1,1).

Nr.	Darstellung des Musters	4-dimensionales KS x-Variable	4-dimensionales KS y-Variable	3-dimensionales KS x-Variable	3-dimensionales KS y-Variable	charakt. Tupel
1		2o.o	17.54	o.o	o.o	(o)
2		3o.o 1o.o	19.o 12.3	2o.o	6.7	(1,2)
3		29.79 1o.2	18.94 12.5	19.59	6.44	(1,3)
4		32.68 6.8 21.o3 19.42	18.6 1o.o 17.9 19.4	-o.48 13.74 12.14	-3.35 4.55 4.o4	(2,2)

Für den zum Gebiet (o,1,1) (Tab. 5.2.6.) angegebenen Parametersatz sind 9 st.-st. gefunden, von denen 4 stabil sind. Die aufgerundeten Zahlenwerte, der dem Betrag nach geordneten Eigenwerte des stabilen st.-st. ohne innere Symmetrie Nr. 4, lauten:
(-9.63, -9.o, -o.96 $\pm$1.77i, -o.59 $\pm$1.68i, -o.26, -o.22). Die Bahn dieses st.-st. geht im 3-dim. Raum durch den 7. Oktanten.
Der st.-st. Nr. 1 hat 2 positive Eigenwerte. Die st.-st. Nr. 2 und Nr. 3 haben je einen positiven Eigenwert. Dieser ist betragsmäßig sehr klein.

Zu dem Fall 3 gehöhrt das Gebiet (1,2,1) (Tab. 5.2.7.). Ein Parametersatz, für den es einen stabilen st.-st. ohne innere Symmetrie gibt, ist der folgende:

$(\quad \alpha, \mathcal{H}, \varphi, \chi, \delta \quad) = (1,\ 1,\ 8o,\ 2o,\ 1.25),$

$(p_{hx}, p_{hy}, p_{vx}, p_{vy}) = (o.2,\ 1.5,\ o.42,\ 2.7).$

Daraus lassen sich die folgenden Größen berechnen:

$(\beta_j) = (-3, -5.4, -8.4)$; $j \in \{1,2,3\}$,

$(\vartheta_j) = (1.4,\ 1.84,\ 2.24)$,

$(\delta_j) = (2.14,\ 2.93,\ 3.75)$.

Für den zum Gebiet (1,2,1) (Tab. 5.2.7.) angegebenen Parametersatz sind 19 st.-st. gefunden, von denen 6 stabil sind, nämlich Nr. 3 und 5 . Die Bahnen von Nr. 5 und 6 gehen im 3-dim. KS durch den 7. Oktanten, während die von Nr. 7 durch den 1. Oktanten geht. Die aufgerundeten Zahlenwerte, der dem Betrag nach geordneten Eigenwerte des stabilen st.-st. ohne innere Symmetrie Nr. 5, lauten:
(-38.29, -1o.48, -7.27, -4.31, -o.81 $\pm$1.27i, -o.51, -o.38). Der st.-st. Nr. 1 hat 3 positive Eigenwerte. Der st.-st. Nr. 7 hat 2 positive Eigenwerte. Die st.-st. Nr. 2 und 4 und 6 haben je einen positiven Eigenwert.

Tab. 5.2.7.

Beispiel für das Gebiet (1,2,1) (Fall 3).

lfd Nr.	Darstellung des Musters	charakt. Tupel	4-dimensionales KS		3-dimensionales KS	
			x-Variable	y-Variable	x-Variable	y-Variable
1		(o)	2o.o	17.54	o.o	o.o
2		(1,1)	32.9 7.o4	21.4 9.33	25.86	12.o6
3		(1,2)	36.37 3.62	18.91 7.75	32.75	11.15
4		(1,3)	34.13 5.87	17.24 9.7	28.26	7.53
5		(2,2)	27.74 25.1o 25.38 1.77	2o.87 19.19 17.67 1o.4o	12.84 13.13 -1o.48	5.99 4.47 -2.79
6		(2,2,2)	36.3 4.3 36.18 3.19	19.o1 8.o7 18.86 7.65	o.619 32.49 -o.498	o.289 11.o7 -o.13
7		(2,1)	21.5 19.92 19.16 19.4	18.o9 17.62 17.18 17.2	1.43 o.67 o.9o8	o.669 o.228 o.242

5.2.3. Grenzen der Gebiete, in denen weitere st.-st. ohne innere Symmetrie auftreten.

Für den Parametersatz (α, $\mathcal{H}$, φ, χ, γ) = (1, 1, 8o, 2o, 1.25), (p_{hx} , p_{hy} , p_{vx}) = (o.o1, o.o7, o.5) wechselt zwischen den Werten des Parameters p_{vy} = 3.o1 und 3.o15 für den st.-st. mit einfacher innerer Symmetrie (1,2) die Stabilität. D.h. p_{vy} = 3.o1 liegt im Gebiet (o,1,1) und p_{vy} = 3.o15 im Gebiet (o,2,1). Im Gebiet (o,2,1) wird außer dem stabilen st.-st. ohne innere Symmetrie ein weiterer instabiler gefunden. Die Grenze zwischen den beiden Gebieten ist eine Grenze zwischen Fall 2 und Fall 3.

Tab. 5.2.8.

Beispiel für das Gebiet (o,2,1). (p_{vy} = 3.o15)

lfd Nr.	Darstellung des Musters	charakter. Tupel	4-dimensionales KS		3-dimensionales KS	
			x-Variable	y-Variable	x-Variable	y-Variable
1		(o)	2o.o	17.54	o.o	o.o
2		(1,2)	31.12	18.92	22.25	7.38
			8.87	11.54		
3		(1,3)	3o.92	18.87	2o.85	7.16
			9.o7	11.71		
4		(2,2)	33.2	18.53	-o.48	-3.49
			6.32	9.66	15.65	5.15
			22.45	18.34	11.23	3.68
			18.o3	16.83		
5		(2,2,2)	32.67	18.66	-o.3	-2.21
			7.o2	1o.18	2o.12	6.62
			27.45	19.o6	5.52	1.8
			12.85	14.19		

Für den vollsymmetrischen st.-st. (o) werden in beiden Gebieten 2 positive Eigenwerte gefunden. Die andern instabilen st.-st. beider Gebiete haben einen positiven Eigenwert.

Wertemäßig liegt der gefundene instabile st.-st. ohne innere Symmetrie (2,2,2) zwischen dem in diesem Gebiet stabilen st.-st. mit innerer Symmetrie (1,2) und dem stabilen st.-st. ohne innere Symmetrie (2,2,). (Tab. 5.2.9.) Die 6 stabilen st.-st. werden durch dazwischen ligende instabile st.-st. voneinander getrennt. Die st.-st. (2,2,2) trennen im Variablenraum die Einflußbereiche der stabilen st.-st. .

Es ist anzunehmen, daß die st.-st. (1,2) und (2,2,2) an der Gebietsgrenze von (o,1,1) und (o,2,1) miteinander verschmelzen. D.h. vermutlich ist die Stabilitätsgrenze von st.-st. (1,2) gleich der Exiztenzgrenze von st.-st. (2,2,2) .

Tab. 5.2.9.

Instabile st.-st. auf der Grenze der Einflußbereiche der stabilen st.-st. . x-Variablen im 4-dim. KS für alle st.-st. vom Typ (1,2), (2,2) und (2,2,2). Beispiel für das Gebiet (o,2,1).

charakter.	((2,2),1)	((2,2,2),1)	((1,2),1)	((2,2,2),2)	((2,2),2)
Tupel	stabil	instabil	stabil	instabil	stabil
x Variable	33.2o	32.67	31.12	27.45	22.45
	6.32	7.o2	8.87	12.85	18.o3
	22.45	27.45	31.12	32.67	33.2o
	18.o3	12.85	8.87	7.o2	6.32
charakter.	((2,2),3)	((2,2,2),3)	((1,2),2)	((2,2,2),4)	((2,2),4)
Tupel	stabil	instabil	stabil	instabil	stabil
x Variable	6.32	7.o2	8.87	12.85	18.o3
	33.2o	32.67	31.12	27.45	22.45
	18.o3	12.85	8.87	7.o2	6.32
	22.45	27.45	31.12	32.67	33.2o

Die Parameterraumuntersuchungen haben ergeben, daß die Kurven für verschwindende Eigenwerte, d. h. die Stabilitätsgrenzen, des vollsymmetrischen st.-st. gleich den Existenzgrenzen der st.-st. mit einfacher innerer Symmetrie sind. Für jeden positiven Eigenwert des vollsymmetrischen st.-st. tritt ein Paar st.-st. mit einfacher innerer Symmetrie auf.

Das Stabilitätsgebiet für die st.-st. (1, .) erscheint nicht in jedem Fall zusammenhängend. Nahe der Existenzgrenze liegt ein Ast der Stabilitätsgrenze und grenzt einen Stabilitätsbereich ein, in dem der vollsymmetrische st.-st. instabil und ein st.-st.-Paar mit einfacher innerer Symmetrie stabil ist. Im durch die Stabilitätsgrenze getrennten anschließenden Gebiet treten instabile st.-st. mit innerer Symmetrie neben stabilen ohne innere Symmetrie auf. Als Beispiel hierfür wurde oben der Parametersatz aus dem Gebiet (o,1,1) angegeben. Im durch den andern Ast der Stabilitätsgrenze getrennten anschließenden Gebiet z. B. (o,2,1) wird ein st.-st.-Paar mit einfacher innerer Symmetrie wieder stabil und zusätzlich tritt noch ein Quadrupel instabiler st.-st. ohne innere Symmetrie auf.

Diese Befunde machen ein Verzweigungsdiagramm mit der Struktur der Abbildung (Abb. 5.2.2.) wahrscheinlich. Da sich aber alle st.-st. mit einfacher innerer Symmetrie gleichartig verhalten, läßt sich das Verzweigungsdiagramm entsprechend (Abb. 5.2.3.) ergänzen.

Dieses vermutete Verzweigungsdiagramm stimmt auch mit dem Befund überein, daß im Gebiet (2,2,2) 31 st.-st. gefunden wurden, allerdings waren in dem Beispiel alle st.-st. ohne innere Symmetrie instabil.

Da aber keine analytische Aussage über die Stabilitätsgrenze der st.-st. ohne innere Symmetrie möglich war, kann diese Vorhersage aus dem Verzweigungsdiagramm der st.-st. mit innerer Symmetrie nicht gewonnen werden. Ob von den st.-st. ohne innere Symmetrie weitere Verzweigungen erfolgen, ist nicht klar.

Wenn aus Mustern mit der Standgruppe E abgezweigt wird, gehören die paarweise abzweigenden st.-st. zu verschiedenen Bahnen, während sie bei Abzweigungen aus Mustern mit SG höherer Ordnung zur selben Bahn gehören. 4 Paare solcher Quadrupel von st.-st. könnten die Anzahl der Lösungen um 32 auf 63 erhöhen. Nach dem Bézout'schen Satz muß es aber 64 geben.

Abb. 5.2.2.

Schematische Darstellung eines wahrscheinlichen Verzweigungsdiagramms für einen st.-st.-Typ mit einfacher innerer Symmetrie (1, .) z.B. (1,2).

Eine skalare Funktion f des Variablenvektors $(\underline{x},\underline{y})$ wird gegen eine skalare Funktion g des Parametervektors $(\underline{p})$ aufgetragen. $g(\underline{p})$ ist z.B. p_{vy} bei festgehaltenen übrigen Parametern. $f(\underline{x},\underline{y})$ ist z.B. eine entzerrte Darstellung der Variable ξ_i bei Nichtbeachtung der übrigen Variablen. Charakteristische Tupel entsprechend Tab. 5.2.9. .

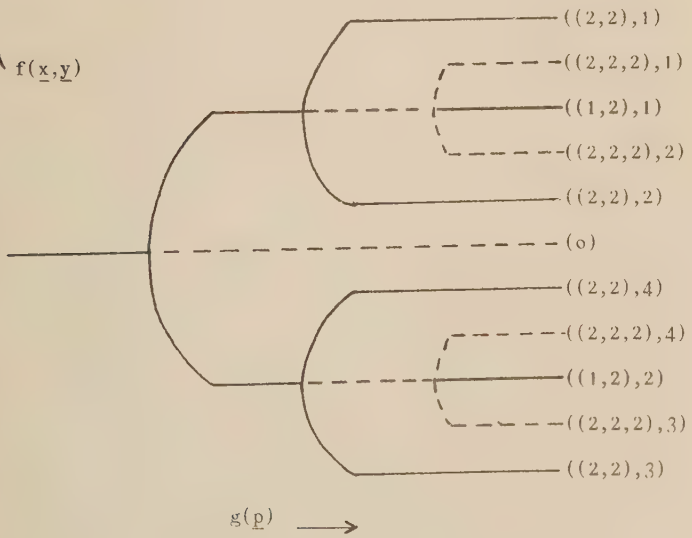
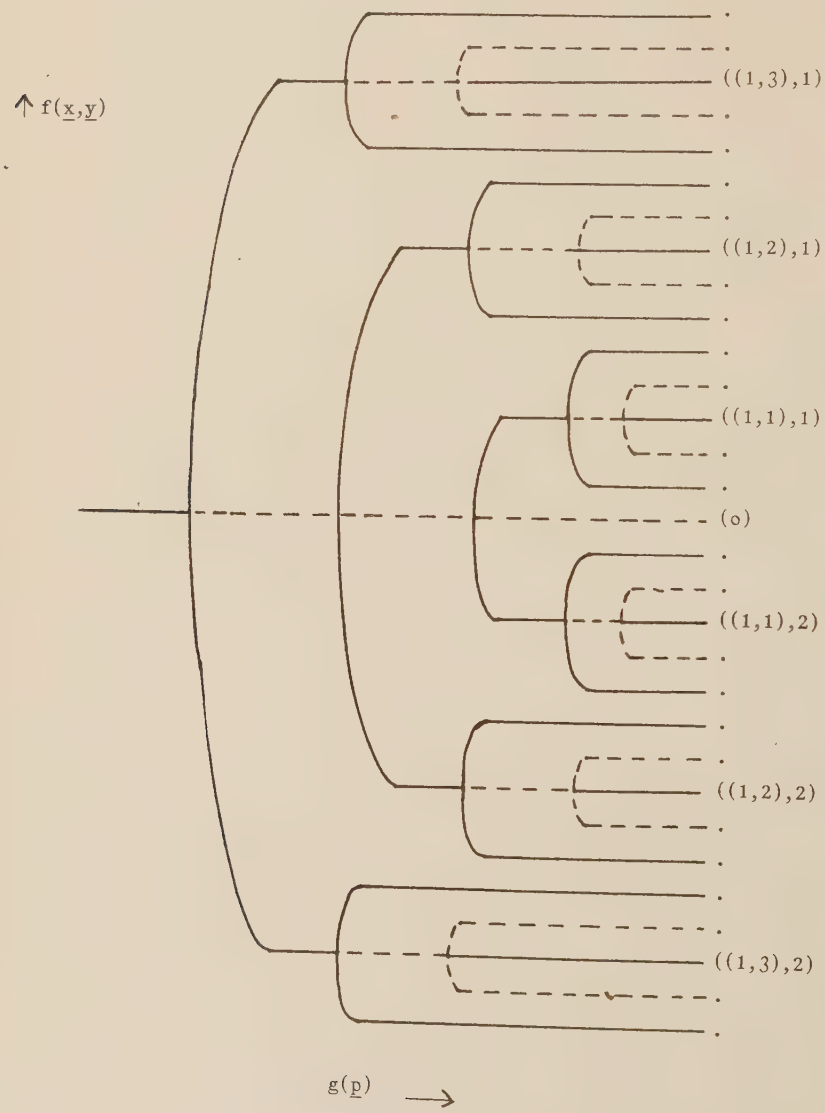


Abb. 5.2.3.

Schematische Darstellung eines wahrscheinlichen Verzweigungsdiagramms für sämtliche st.-st. mit innerer Symmetrie.



Eine weitergehende Untersuchung des Verzweigungsdiagramms und des Bézout'schen Satzes führt über das Ziel dieser Arbeit hinaus. Mit Hilfe einer Untersuchung der Verzweigungen wäre eine genauere Charakterisierung der st.-st. möglich. Sie müßten streng genommen durch ihre Lage in der Nähe der Verzweigung und nicht durch ihre Lage bei einem beliebigen Parametersatz charakterisiert werden.

Als weiteres Beispiel für eine Gebietsgrenze sei der Parametersatz ($\alpha, \beta, \gamma, \chi, \delta$) = (1, 1, 80, 20, 1.25), (P_{hx} , P_{hy} , P_{vx}) = (0.01, 0.07, 0.48) angegeben. Zwischen den Parameterwerten p_{vy} = 2.86 und 2.87 wurde eine äquivalente Gebietsgrenze gefunden; nämlich die Grenze zwischen den Gebieten (0,1,1) und (0,1,2). Auch hier tritt einer neuer instabiler st.-st. ohne innere Symmetrie auf. Auch dieser liegt wertemäßig zwischen den stabilen st.-st., was die folgenden x-Variablen belegen:

charakteristisches Tupel	((2,2),1) stabil	((2,2,2),1) instabil	((1,3),1) stabil
x Variable	33.09	31.71	30.8
	6.42	8.15	9.15
	19.57	10.5	9.15
	20.9	29.6	30.8

Im Gegensatz zum ersten Beispiel ist hier der st.-st. (1,3) mit dem Muster stabil.

5.2.4. Beispiel für die Erreichbarkeit eines stabilen st.-st. ohne innere Symmetrie.

Die Möglichkeit stabile st.-st. zu erreichen wird durch das Auftreten vieler instabiler st.-st. sehr erschwert. Die stabilen st.-st. werden im Variablenraum von Einzugsbereichsgrenzen, Separatrizen umgeben. In diesen Grenzmannigfaltigkeiten liegen die instabilen st.-st.. In vielen untersuchten Beispielen haben die instabilen st.-st. nur einen positiven Eigenwert, und dieser ist häufig auch betragsmäßig sehr klein, so daß eine Untersuchung der Dynamik ziemlich aufwendig wird. Für einen Parametersatz im Gebiet (1,0,0) wurde eine Simulation gemacht, in der ein stabiler st.-st. ohne innere Symmetrie erreicht wurde.

Tab. 5.2.10.

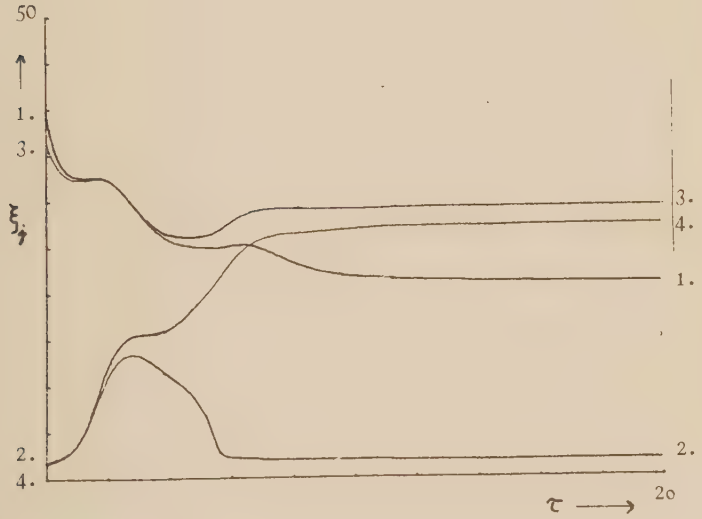
Die st.-st. mit einfacher innerer Symmetrie für den Parametersatz $(p_{hx}, p_{hy}, p_{vx}, p_{vy}) = (0.2, 1.5, 0.4, 5.0)$ in dem Gebiet (1,2,2).
$(\beta_j) = (-3, -10, -13)$, $(\vartheta_j) = (1.4, 1.8, 2.2)$,
$(\delta_j) = (2.14, 5.55, 5.9)$; $j \in \{1,2,3\}$.

charakt. Tupel	4-dimensionales KS		3-dimensionales KS		Darstellung des Musters
	x-Variable	y-Variable	x-Variable	y-Variable	
(1,1)	32.9 7.0	21.4 0.3	25.9	12.1	
(1,2)	38.37 1.62	18.7 12.1	37.75	0.0	
(1,3)	37.9 2.09	15.98 9.0	35.8	0.08	

In der Nähe des Punktes ((1,2),1) wurde gestartet unter der Regie eines Parametersatzes (p_{hx} , p_{hy} , p_{vx} , p_{vy}) = (0.2, 1.5, 0.7, 4.0), dabei wurde ein stabiler st.-st. ohne innere Symmetrie approximiert bis zu dem Wert ($\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4, \eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4$) = (22.27, 1.95, 29.05, 26.76, 15.75, 10.13, 20.95, 19.88)

Abb. 5.2.4.

Ein steady state ohne innere Symmetrie wird approximiert, die Konzentrationen der Substanz x in den 4 Kompartementen j werden gegen die Zeit aufgetragen.



5.3. Möglichkeit eines inversen Zuganges oder die Berechnung der Koeffizienten einer Darstellung einer Hyperfläche durch unabhängige Lösungspunkte.

Die Menge der Lösungspunkte eines Gleichungssystems ist diejenige null-dimensionale Mannigfaltigkeit, die im Durchschnitt der Hyperflächen liegt, die durch die einzelnen Gleichungen des GIS beschrieben werden. Eine Hyperfläche m-ter Ordnung im n-dimensionalen Raum ist durch ein Multinom mit n Variablen beschreibbar, wobei n - 1 Variablen unabhängig sind; wobei der Term vom höchsten Grad den Grad m erreicht. Der Grad eines Terms ist die Summe der Exponenten der Variablen. Die einzelnen Gleichungen in dem 8 - bzw. 3-dim. Gleichungssystem sind Gleichungen für Hyperflächen.

Eine Hyperfläche m-ter Ordnung im $\mathbb{R}^n$ ist eindeutig durch $\binom{m+n}{n} - 1$ unabhängige Koeffizienten bzw. unabhängige Punkte darstellbar. Wenn die Hyperfläche durch irgendwelche Abbildungen in sich überführbar ist, sind zur eindeutigen Bestimmungen weniger Koeffizienten nötig.
So ist der Kreis als "Hyperfläche" zweiter Ordnung [21] in allgemeiner Lage nicht durch fünf sondern durch drei unabhängige Koeffizienten oder durch 3 unabhängige Punkte bestimmt.

Allgemeine Kreisgleichung; abhängig von 3 unabhängigen Koeffizienten:

$$x^2 + y^2 + ax + by + c = 0 \qquad (5.3.1.).$$

Allgemeine Determinante zur Kreisgleichung; abhängig von 3 unabhängigen Punkten: (x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3):

$$\begin{vmatrix} x^2 + y^2 & x & y & 1 \\ x_1^2 + y_1^2 & x_1 & y_1 & 1 \\ x_2^2 + y_2^2 & x_2 & y_2 & 1 \\ x_3^2 + y_3^2 & x_3 & y_3 & 1 \end{vmatrix} = 0 \qquad (5.3.2.).$$

Aus einer solchen Determinante lassen sich die Koeffizienten zurückrechnen. Wobei der Koeffizient beim führenden Term auf 1 normiert wird.

Eine solche Determinante läßt sich für jede Hyperfläche bilden, für die nur genügend unabhängige Punkte bekannt sind.

Für das 3-dim. System hat die Determinante der ersten Hyperfläche folgende Gestalt:

$$\begin{vmatrix} y_1^2\, y_2\, y_3 & y_1\, y_3^2 & y_1\, y_2^2 & y_1^3 & y_2\, y_3 & y_1 & 1 \\ a_{11}^2\, a_{12}\, a_{13} & a_{11}\, a_{13}^2 & a_{11}\, a_{12}^2 & a_{11}^3 & a_{12}\, a_{13} & a_{11} & 1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{61}^2\, a_{62}\, a_{63} & a_{61}\, a_{63}^2 & a_{61}\, a_{62}^2 & a_{61}^3 & a_{62}\, a_{63} & a_{61} & 1 \end{vmatrix} = 0 \quad (3.).$$

6 unabhängige Punkte sind zur Bestimmung der Koeffizienten nötig. Da aber der Ursprung des Koordinatensystems auf jeden Fall ein Punkt der Hyperfläche ist, - die Gleichungen besitzen keinen von den Variablen freien Term, - die Unterdeterminante der (6,6)-Matrix der 6 Lösungspunkte wird Null, - reichen sogar 5 unabhängige Punkte aus. Nach Normierung des Koeffizienten des führenden Terms auf 1 in den Gleichungen sind auch für die Gleichung nur 5 unabhängige Koeffizienten vorhanden. Die Determinante lautet damit:

$$\begin{vmatrix} y_1^2\, y_2\, y_3 & y_1\, y_3^2 & y_1\, y_2^2 & y_1^3 & y_2\, y_3 & y_1 \\ a_{11}^2\, a_{12}\, a_{13} & a_{11}\, a_{13}^2 & a_{11}\, a_{12}^2 & a_{11}^3 & a_{12}\, a_{13} & a_{11} \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ a_{51}^2\, a_{52}\, a_{53} & a_{51}\, a_{53}^2 & a_{51}\, a_{52}^2 & a_{51}^3 & a_{52}\, a_{53} & a_{51} \end{vmatrix} = 0 \quad (4.).$$

Die Lösungen mit einfacher innerer Symmetrie mit ihrer Lage auf den Achsen sind nicht brauchbar zur Bestimmung von Koeffizienten in dem allgemeinen GlS. Aber gerade das weniger leicht durchschaubare Verhalten der Lösungen ohne innere Symmetrie könnte mit Hilfe der Determinante aufgeklärt werden.

Werden 2 Punkte gewählt, die zur selben Bahn gehören, so entstehen 2 linear abhängige Zeilen in der Determinante; solche Punkte sind nicht unabhängig.

Nur in dem Teil des Parameterraumes, in dem mindestens 5 Typen von st.-st. ohne innere Symmetrie vorhanden sind, kann eine inverse Berechnung durchgeführt werden. D.h. ausgehend von 5 postulierten Punkten lassen sich die Koeffizienten des GlS berechnen und aus diesen die y-Werte der 3 Typen mit einfacher innerer Symmetrie. Da die Koeffizienten der Gleichungen Funktionen der Parameter sind, ist die vollständige Inversion nur möglich, wenn sich die Parameter aus den Koeffizienten berechnen lassen. Die hier erreichbare Inversion ist geeignet einen Satz gefundener Lösungspunkte auf seine Richtigkeit zu überprüfen und vielleicht eine kleine Variation einzelner Lösungen in der Nähe von Gebietsgrenzen zu untersuchen.

5.4. Zusammenfassende Betrachtung der Ergebnisse.

5.4.1. Die Güte des numerischen Verfahrens.

Die Güte des globalen Trajektorien-Verfahrens läßt sich dadurch bestimmen, wieviele Lösungen durch die gruppentheoretische Komplettierung ergänzt werden müssen, wenn vom Programm etliche Lösungen gefunden sind. Im besten Beispiel werden von 19 Lösungen 19 Lösungen gefunden. Dies war der Fall im Beispiel aus dem Gebiet (1,2,1).

Dies war aber auch das einzige Beispiel in dem keine gruppentheoretische Komplettierung erforderlich war. Im zweitbesten Beispiel wurden von den 31 gefundenen und erschlossenen mit dem globalen Trajektorien-Verfahren 25 Lösungen gefunden. In einem anderen Fall, Beispiel für das Gebiet (o,1,2), wurde das algebraisch zugängliche Paar (1,2) nicht mit dem Trajektorien-Verfahren gefunden und hätte darum auch nicht gruppentheoretisch (gt) erschlosssen werden können.

Das globale Trajektorien-Verfahren ist zur Suche nach sämtlichen st.-st. für ein allgemeines GlS nur bedingt brauchbar. In einem Gleichungssystem mit Symmetrien lassen sich durch die gruppentheoretischen Ergänzungen und die algebraische Lösbarkeit einiger Punkte mit innerer Symmetrie, wie im vorliegenden Fall, befriedigende Ergebnisse erzielen.

Nach dem Satz von Bézout sind für das GlS bis zu 64 Lösungen zu erwarten. Mehr als 31 Lösungen wurden durch die Kombination von GT und globalem Trajektorienverfahren nirgends gefunden. Die Überlegungen mit dem Verzweigungsdiagramm zeigen, daß die Anzahl der reellen Lösungen in vielen Gebieten des Parameterraums 31 nicht übersteigt.
Eine vollständige Bewertung der Güte des numerischen Verfahrens ist vielleicht mit einem vollständigen Verzweigungsdiagramm möglich.

5.4.2. Schwellenwerte der Parameter.

Die Untersuchungen haben gezeigt, daß für verschiedene Bereiche der Steuer-Parameter verschiedene Muster existieren und stabil sind, und zwar sind alle Muster vertreten, die gruppentheoretisch vorhersagbar sind. In dem Gebiet in dem keine Lösung mit innerer Symmetrie stabil ist, sind auf jeden Fall solche ohne innere Symmetrie stabil. Die Grenzen der Gebiete werden durch die Kombination mehrerer nicht steuerbarer Parameter und mehrerer Steuerparameter bestimmt. In dieser Arbeit werden die Gebietsgrenzen in Bezug auf die Membrandurchlässigkeiten als steuerbare Größen untersucht bei festgehaltenen übrigen Parametern. Eine Veränderung dieser Größen, z. B. der Zuflüsse als Steuerparameter, bringt das System auch in ein anderes Gebiet des Parameterraums. D. h. es gibt für für viele Kombinationen der übrigen Parameter z. B. des Flußparameters, Schwellenwerte mit Übergang zu einem anderen stabilen Muster.

6. Als Ausblick: gruppentheoretische Betrachtungen zur Blattstellungslehre der Botanik.

Da Pflanzen als offene Form an ihrem Körper dauernd gewisse Bezirke embryonalen Gewebes besitzen, können sie bzw. diese embryonalen Bezirke als einfaches Modell für die Musterbildung in der Ontogenese dienen. Längs der Sproßachse erscheint eine periodische oder fast periodische Struktur, die durch Knoten und Internodien-Bereiche charakterisiert ist und durch ein zeitliches Nacheinander entsteht. In den Knoten gibt es Blattanordnungen mit unterschiedlicher Symmetrie.

Die Symmetriegruppe einer Blattanordnung an einem Knoten läßt sich durch die Bestimmung aller Symmetrieoperationen, die die Blattanordnung festlassen, ermitteln.

Bei wechselständiger oder schraubiger Blattstellung befindet sich jeweils nur ein Blatt an einem Knoten. Zwei Symmetrieoperationen: eine Spiegelung an der vertikalen Ebene, in der die Blattmitte liegt, und die Identität halten das Blatt in seiner Position fest. Die Standgruppe ist die C_{1v} und hat die Ordnung 2.

Bei gegenständiger Blattstellung inserieren jeweils 2 Blätter an einem Knoten. 4 Symmetrieoperationen: 2 Spiegelungen, die Identität und und eine Drehung um 180° halten die Blattanordnung in ihrer Stellung fest. Die Standgruppe ist die D_2 und hat die Ordnung 4.

Bei wirtel- oder quirlständiger Blattstellung z. B. beim Oleander mit 3-zähligen Wirteln, befinden sich jeweils $n > 2$ Blätter in einem Knoten. 2 n Symmetrieoperationen: n Spiegelungen, die Identität und n-1 Drehungen um den Winkel $l \cdot 2\pi/n$, $l \in \{1,2,\ldots,n-1\}$, halten die Blattanordnung in ihrer Stellung fest. Die Standgruppe ist die Diedergruppe D_n der Ordnung 2n.

Abweichungen der ausgebildeten Blätter von der Symmetrie, z. B. Kastanienblätter im äußeren Schwerefeld, gehen wohl auf Einflüsse zurück, die nach der Entstehung der Blattanlagen wirksam werden. Hier wird die Symmmetrie der Blattanlagen als wesentlich für den zu bestimmenden Musterbildungsvorgang betrachtet.

Aus der Anordnung der Leitbündel in den Internodien kann vielleicht auf die Standgruppe in den Internodienbereiche geschlossen werden. Diese Standgruppe entspricht vielleicht der Gruppe der zulässigen Symmetrie-Operationen des noch nicht differenzierten Zellaggregats in der Spitze des Vegetationskegels. Allerdings sind im Vegetationskegel in den Abschnitten zwischen den Knotenanlagen noch keine Leitbündel vorhanden. Die Anordnung der Leitbündel gibt Auskunft über die Standgruppe des Leitbündelbildungsprozesses.

Die Standgruppenordnung der Internodienanlagen läßt sich nach oben abschätzen, wenn die Zellanordnung in einem Querschnitt untersucht wird, falls die Zellwände einen wesentlichen Einfluß auf das Transportsystem der möglichen morphogenetischen Substanzen haben.

Bei den im Modell als Zellen bezeichneten Gebilden muß es sich nicht um biologisch als Zelle bezeichnete Gebilde handeln. Vielmehr können die Modellzellen auch Aggregate gleichartiger Zellen sein.

Auf jeden Fall wechselt die Standgruppe zwischen Knoten- und Internodienanlage. Solche Wechsel der Standgruppe treten aber bei fast allen Samenpflanzen auch zwischen den verschiedenen Knoten am selben Sproß oder sogar entlang einer Sproßachse auf.

Die Gymnospermata (Nacktsamigen) verfügen meist über wirtelständige Keimblattanordnungen und schraubige Anordnungen der Fruchtstände. Die Dicotyledonen (Zweikeimblättrigen) haben zumeist mindestens einen gegen-

ständigen Keimblattknoten (Name) und sehr häufig wirtelständige, etliche aber auch schraubige Anordnungen der Blütenglieder, viele Arten haben zudem wechselständige Anordnungen der Tragblätter in den Blütenständen. Die Monocotyledonen (Einkeimblättrigen) haben wechselständige Anordnungen der Laubblätter und fast alle haben wirtelständige Anordnungen der Blütenglieder. Blüten lassen sich ähnlich wie Kristalle nach ihren Symmetrien klassifizieren. Allerdings können die einzelnen "Blütengliederkreise" verschiedene Symmetriegruppen haben.

Die Wechsel der Symmetrie zwischen den Knoten entlang einer Sproßachse, wie sie gelegentlich sogar von gegenständiger zu trimerer Laubblattstellung bei Flieder und Esche zu beobachten sind, werden so erklärt, daß der Sproßumfang im Verhältnis zur Größe der Blattanlage wechselt, d. h. die Größe des Wirkungsfeldes wechselt im Verhältnis zu den Wechselwirkungsparametern. Je mehr Zellen ein quasi-polygonales Zellaggregat besitzt, um so höher ist die Ordnung ihrer Symmetriegruppe. oder je weniger weitreichend die Wechselwirkung in einem quasi-kreisförmigen Gebilde sind, um so höher ist die Ordnung der Symmetriegruppe.

Die Wechsel der Symmetrie zwischen Knoten und Internodienbereich lassen sich nach dem Funktionsmodell eines Reaktions-Transport-Systems so erklären, daß ein Steuerparameter z. B. der Zufluß oder die Membrandurchlässigkeit sich ändert und dadurch das maßgebliche Interaktionsfeld unter verschiedene Regie gerät, d. h. in verschiedene Parameterbereiche, in denen unterschiedliche Muster stabil sind.

Das Modell macht keine Aussage darüber, wie solche Substanzverteilungsmuster sich in Strukturmuster umsetzen.

Dafür ist wohl ein Mechanismus mit einem Schwellenwert nötig, wie

er z. B. für das Auxin Indolessigsäure angenommen wird. D. h. nach der Einwirkung der Substanzverteilungsmuster auf das Zellaggregat verhalten sich die Zellen, für die die Substanzkonzentration über dem Schwellenwert lag, anders als die, für die sie unter dem Wert lag. Verschiedene Zustände, die eine Zelle im Verlauf einer stufenweisen Ausdifferenzierung durchläuft, werden vielleicht verschiedene Schwellenwerte haben und oder auch auf verschiedene Substanzen mit möglichen Verteilungsmustern verschieden reagieren. Im Modell braucht z. B. nur das Verteilungsmuster einer Substanz manifest zu werden. Es können aber auch Differenzen der Verteilungsmuster beider Substanzen manifest werden. Das Manifestwerden eines vorausgegangenen Substanzverteilungsmusters durch einen Schwellenwertmechanismus bedeutet eine Abbildung, Transformation des Musters der Größensorten in ein Muster über- und unterschwelliger Größen. Hierbei werden Muster ohne innere Symmetrie zum Teil in solche mit innerer Symmetrie transformiert.

Auch bei Einzellern treten je nach Umweltbedingungen z. B. Wechsel der Stoffwechselwege auf; d. h. Zellen können in Abhängigkeit vom Schwellenwert bestimmte Zustände einnehmen, z. B. anaerob oder aerob sein.

Es läßt sich denken, daß im einfachen Fall, wenn z. B. ein Nährstoff z. B. Zucker oder Sauerstoff eine Substanz eines Verteilungsmusters ist und sich auf einer Seite der Sproßachse anreichert, hier das Zellwachstum so angeregt wird, daß sich eine Ausstülpung bildet, die dann zur Blattanlage ausdifferenzieren kann. Eine solche sich bildende Blattanlage könnte dann ihrer Umgebung soviel Nährstoff entziehen, daß in dem über ihr liegenden Abschnitt des Vegetationskegels die vollsymmetrische Struktur stabil ist, jedenfalls so lange, bis der Nährstoffstrom wieder

hauptsächlich in die Spitze fließt und so diese in den Parameterbereich einer nicht vollsymmetrischen Struktur gerät und so könnte sich hier wieder die nächste Knotenanlage mit Blattanlagen bilden.

Implizit ist eine Überlagerung von zwei Feldern: ein Gradienten- (Polaritäts-) Feld des Zustroms des Nährstoffs und quer zum Gradientenfeld ein Interaktionsfeld von gleichkompetenten Zellen, in dem sich die nach dem hier beschriebenen Funktionsmodell möglichen Substanzverteilungsmuster bilden können, wobei der Zustrom die Steuergröße darstellt.

Ein solches Gradientenfeld wird z. B. bei den Embryonen der Samenpflanzen schon bei der ersten inäquivalenten Zellteilung sichtbar. Inwieweit diese inäquivalente Teilung auch durch ein einfaches vorausgehendes inäquivalentes Substanzverteilungsmuster erklärt werden kann, ist unklar.

Es ließe sich aber so denken, daß die Größe des Zustroms einer Substanz von außen in einem entsprechenden Bereich liegt, daß eine Nichtgleichverteilung in der Zelle erzwungen wird. Als Steuerparameter für den Zustrom käme hier wohl die Membrandurchlässigkeit der z. B. befruchteten Eizelle in Frage. Eine z. B. mit der Befruchtung auftretende Änderung der Membrandurchlässigkeit könnte eine Ungleichverteilung einer Substanz erzeugen, wobei die Eintrittstelle des Gameten eventuell die Richtung dieser Polarität bestimmen kann.

Das Reaktions-Transport-Modell setzt nicht voraus, daß Zellmembranen Träger des Transports sind. Es ist auch mit Diffusion z. B. im inneren einer Zelle möglich, Muster zu erzeugen. Allerdings müssen wegen der geringen Diffusionkonstanten eventuell größere Volumen vorhanden sein, um Muster zu erzeugen. Ob sich die Diffusionskonstanten und die Eizellengrößen miteinander vereinbaren lassen, habe ich nicht überprüft.

Der Reaktionsraum muß aber nicht unbedingt das Innere von Zellen sein, es kann auch die Oberfläche der Zellen sein. Hier können bekanntlich außer chemischen Substanzen auch physikalische Größen, wie elektrische Ladungen, miteinander in Wechselwirkung treten und vielleicht ein erstes Muster ausbilden, das dann über einen geeigneten Folgemechanismus manifest wird.

Ob das Gesamtfeld des Vegetationskegels mit seinen Blattanlagen nun ein Überlagerungsfeld aus Gradientenfeld und quer dazu stehendem, als fast unabhängig zu betrachtendem Interaktionsfeld von gleichkompetenten Zellen ist, oder ob es ein kompliziertes großräumiges Interaktionsfeld in der Tunikaschicht ist, in dem nach einem mit dem Sperreffekt in Meristemen oder Meristemoiden gedeuteten Abstandsverhältnis sich Initialzellen von Blattanlagen bilden, läßt sich nach dem noch zu allgemeinen Modell des RT-Systems nicht entscheiden.

Allerdings zeigen Naturbeobachtungen, wie z. B. der Übergang von gegenständiger zu schraubiger Blattanordnung, daß häufig keine Gleichverteilung bei den fertigen Blättern vorliegt, wie sie der Sperreffekt mit dem Gesamtfeldmodell fordert, sondern dichte Knotenfolgen mit zerstreut stehenden einzelnen Blättern, teilweise sogar 2 Blätter an einem Knoten, die nicht gegenständig sind. Solche unregelmäßigen Anordnungen treten auch in "reduzierten" Blüten bei Blüten- oder Staubblattstellungen auf, d.h. z.B. beim Übergang von schraubiger Hochblattanordnung zu wirteliger Anordnung der Fruchtblätter. Diese Erscheinungen lassen sich mit dem Überlagerungsfeldmodell erklären. Genauere Untersuchungen müssen für den Vegetationskegel selbst gemacht werden. Das Überlagerungsfeldmodell mit einer Nahrungssubstanz oder einer von der Nahrungslage abhängigen Substanz als Interaktionssubstanz könnte die Abhängigkeit von inneren und äußeren Einflüssen bei der Bildung verschiedener Formen oder Typen von Blättern

oder Blattanordnungen erklären, sowie die Fähigkeit, die Blattbildung an sich in weiten Grenzen der Umwelt aufrecht zu erhalten.

Initialzellenverteilungsmuster treten z. B. bei der Bildung von Haaren und Spaltöffnungen von Blättern auf. Störungen dieser Felder werden durch Verletzung in den Blattanlagen hervorgerufen. [22] Symmetrieuntersuchungen solcher Verletzungen und eventuell Einpflanzungen von verschiedenen Materialien können vielleicht Auskunft über die Ausbreitung dieser Felder geben.

Ein schönes Beispiel für den Einfluß der Symmetrie, Geometrie auf die Verteilung von Organen ist das Kalluspräparat vom Flieder von Wetmore und Rier [23] . In einem zylindrischen Gradienten-Feld folgt eine zylindrische Anordnung von Leitbündelnestern, in einem ungeordneten Feld erfolgt eine unregelmäßige Verteilung der Nester.

Daß aus isolierten Blattanlagen Seitensproßen werden [24] spricht dafür, daß zur Ausdifferenzierung ein bestimmtes Entwicklungsfeld nötig ist. Isolierung bedeutet Erhöhung der Ordnung des Symmetriegruppe des zellulären Gebildes.

Die Symmetriegruppenordnung eines einzelnen isolierten Blattes ist 2; die einer isolierten Blattanlage anfangs, bevor oben und unten unterscheidbar ist, mindestens 4, die einer Blattanlageninitialzellengruppe könnte sogar 8 sein; die einer jungen isolierten Sproßanlage ist mindestens 4 oder 8; hier ist oben und unten ununterscheidbar. Die Symmetriegruppenordnung der Seitensproßanlage ist 4 selbst unter Einbeziehung von Tragblatt und Hauptsproß, solange wie diese untereinander in Bezug auf den Substanzstrom äquivalent sind. Vielleicht ergibt sich daraus die Notwendigkeit der Bildung von Tragblattanlagen bei allen Seitensproßbildungen der Samenpflanzen.

Die teilweise nur als Rudiment vorhandenen Tragblätter in den Blütenständen bei z. B. den Brassicaceae (Kreuzblütlern) sowie andere als Rudiment gedeuteten Organe aber auch solche nicht als Homologe oder Rudimente deutbaren Organge, wie z. B. das Häutchen mancher Blätter - an der Grenze zwischen dem teilweise röhrenförmig den Sproß umfassenden Unterblatt und der Blattspreite, dem Oberblatt - bei z. B. Gräsern, sind wohl notwendige unverzichtbare Elemente eines Entwicklungsfeldes, und ihr Erscheinen in der Ontogenesis wäre keineswegs nur "eine kurze und schnelle Rekapitulation der Phylogenesis" (Ernst Haeckel 1866), sondern die Bildung von Organen, die im Gesamtbild des fertigen Organismus unbedeutend erscheinen, wäre eine für die ungestörte Entwicklung des einzelnen Organismus notwendige unverzichtbare Errungenschaft der Stammesentwicklung.

Es wäre für die biologische Relevanz des hier vorgestellten Modells von Bedeutung, wie sich eine mögliche isolierte junge Knotenanlage vor Ausbildung der Blattanlagen unter verschiedenem Durchstrom, z. B. von Nahrungssubstanzen verhält. Ob ein solches empfindliches mikroskopisch kleines Zellaggregat so präparierbar ist, daß wirklich ein gerichteter Durchstrom zustande kommt, entzieht sich meiner Kenntnis.

7. Literaturverzeichnis.

1) Kramer, 2) Barman, 3) Sidell et al., 4) Ureta et al., 5) Grimmer, 6) Gerisch, 7) Lugowski, 8) 9) 12) 16) Stiefel & Fässler 10) Klingenberg, 11) 13) Boseck, 10) Hall, 15) Bruijn, 17) Wielandt, 18) Kramer, 19) Seelig, 20) Branin, 21) Rottmann, 22) Bünning et al., 23) Kandeler (Wettmore, R.H.& Rier, J.P.,1963), 24) Wardlaw

Barman,T.E.: Enzyme Handbook, New York 1969

Boseck,H.: Grundlagen der Darstellungstheorie, Berlin 1973

Bünning,E. & Sagromsky,H.: Die Bildung des Spaltöffnungsmusters in der Blattepidermis. Z. Naturforschung 3b, (2o3-16), 1948

Branin jr,F.H.: Method for Solving Nonlinear Equations. IBM J. Res. Development (5o4-22), 1972

Bruijn,N.G. de: Pólyas Abzähl-Theorie: Muster für Graphen und Chemische Verbindungen. Selecta Mathematica III, (1-26), 1971

Cohen,M.H. & Robertson, A.: Wave Propagation in early stages of aggregation of cellular slime molds. J. theor. Biol. 31,(1o1-18),1971

Denzel,B. & Seelig,F.F.: Calculation of Separatrices in Multistable Chemical Reaktion Systems. Z. Naturforschung 33a,(1341-5), 1978

Dixon,L.C.W.;Gomulka,J.;Herson,S.E.: Reflections on the Global Optimization Problem. In: Dixon: Optimization in Action, London 1976

Edelstein,B.: Instabilities Associated with Dissipative Structure. J. theor. Biol. 26, (227-241), 197o

Fässler siehe Stiefel

Gerisch,G.: Zellfunktion und Zellfunktionswechsel in der Entwicklung von Dictyostelium discoideum. Aggrgation homogener Zellpopulationen und Zentrenbildung. Develop. Biol. 3,(685-724),1961

Gerisch,G.: Periodische Signale steuern die Musterbildung in Zellverbänden. Naturwissenschaften 58, (43o-8), 1971

Gerisch,G.;Fromm,H.;Heusgen,A.;Wick,U.: Control of cell-contact sites by cyliic AMP pulses in differentiating Dictyostelium cells. Nature 255, (547-9), 1975

Gerisch,G.;Malchow,D.;Riedel,V.;Müller,E.;Every,M.: cAMP Phosphodiesterase and its inhibitor in slime mold development. Nature New Biology 235, (9o-2), 1972

Gerisch,G. & Hess,B.: cyclic AMP-controlled Oscilations in suspended Dictyostelium cells : Their relation to morphogenetic cel interactions. Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 71, (2118-22), 1974

Gierer,A. & Meinhardt,H.: A theory of Pattern Formation
Kybernetik 12, (3o-39), 1972

Goodwin,B.C. & Cohen,M.H.: A phase-shift model for the spatial and temporal organization of developing systems.
J. theor. Biol. 25, (49-1o7), 1969

Grimmer,G.: Biochemie. Mannheim 1969

Hall,G.G.: Applied Group Theory. London 1967

Kandeler,R.: Entwicklungsphysiologie der Pflanzen. Berlin 1972

Keller,E.F. & Segel, L.A.: Initiation of slime mold aggregation viewed as an instability. J. theor. Biol. 26, (399-415), 197o

Klingenberg,W.: Grundlagen der Geometrie. Mannheim 1971

Kramer,P.: Symmetriestrukturen der Physik.
Naturwissenschaften 69, (114-122),1982

Lugowski,H.: Grundzüge der universellen Algebra. Leipzig 1976

Meinhardt,H.: Models of Biological Pattern Formation. London 1982

Meinhardt,H. & Gierer,A.: Application of a theory of biological pattern formaton based on lateral inhibition.
J. Cell. Sci. 15, (321-346), 1974

Mimura,M. & Murray,J.D.: Spatial structures in a model substrate-inhibition reaction diffusion system. Z. Naturforschung 33c, (58o-6),1978

Rottmann,K.: Mathematische Formelsammlung. Mannheim 196o

Seelig,F.F.: Offene Reaktionsysteme mit Hysterese als chemische Informationselemente. Ber. d. Bunsengesellschaft 8o, (1126-31), 1976

Seelig,F.F.: Chemical Oscilations by substrat inhibition.
Z. Naturforschung 31a, (731-8), 1976

Sidell,B.D. & Beland, K.F.: Lactate Dehydrogenases of Atlantic Hagfish: Physiological and evolotionary implications of a primitive heart isozyme. Science 2o7, (769-7o), 198o

Stiefel,E. & Fässler, A.: Gruppentheoretisch Methoden und ihre Anwendung.
Stuttgart 1979

Turing,A.: The chemical basis of morphogenesis.
Phil. Trans. B. 237, (37-72), 1952

Ureta,T.; Radojković,J.; Díaz,N.; Slebe,J.C.; Lozano,C.: Comparative studies on Glucose phosphorylating Isoenzymes of vertebrates. Arch. Biochem. Biophys. 186, (235-247), 1978

Uspensky,J.V.: Theory of Equations. McGraw Hill Book Company USA 1948

Wardlaw,C.H.: Morphogenesis in Plants. London 1968

Weiss,P.: The principles of development. New York 1939

Wielandt,H.: Finite permutation groups. New York 1964

Winfree,A.T.: The geometry of bological time. New York 1980

Winfree,A.T.: Rotating chemical reactions. Scientific American 6, (82-95), 1974

Wolpert,L: Positional information and spatial pattern of cellular differentiation. J. theor. Biol. 25, (1-47), 1969

Lebenslauf.

Hartmut Hans Gerhard Fromm, geboren am 17. 1.1946 in Zeven / Niedersachsen als Sohn von Irmela Fromm, geb. Peucker und Wolfgang Fromm.

1952 - 56	Grundschule in Heeslingen/Niedersachsen
56 - 66	Gymnasium in Zeven, September 66: Abitur
66 - 83	Studium an der Eberhard - Karls - Universität in Tübingen
66 - 71	Biochemie - Studium, Oktober 70: Diplom - Vorprüfung
1971	Isotopenkurs und Arbeit bei der Bfa f. Lebensmittelfrischhaltung in Karlsruhe
71 - 74	Biologie - Studium, April 74: Diplom - Hauptprüfung Diplomarbeit mit dem Thema: "Wirkung des cAMP - Systems - cAMP und cAMP-Phosphodiesterase - auf die Aggregations-Reifung von Dictyostelium discoideum." unter Anleitung von Dr. G. Gerisch am Friedrich Miescher Labor der Max Planck Gesellschaft.
74 - 83	Chemie - Studium und Arbeit an einer Dissertation am Institut für physikalische und theoretische Chemie
78 - 84	Arbeit an dem Thema: " Musterbildung in einem Reaktions-Transport-System und deren gruppentheoretische Analyse." unter Anleitung von Prof. Dr. F. F. Seelig
1982	Wissenschaftlicher Angestellter am Institut für Toxikologie

Wissenschaftliche Publikationen:

Penner, H & Fromm, H ; Z f Lebensmitteluntersuchung,150,(84-7),1972

Gerisch, G ; Fromm, H ; Heusgen, A ; Wick, U ; Nature, 255,(547-9),1975

Meine akademischen Lehrer waren:

M.Baumann,Bausinger,Bayer,Bues,Bünning,Brecht,Daeke,Frank,Gerisch,Gierer, Gottschalk,Guglielmi,Heinrich(K'he),Henning,Jens,Jüngel,Karfunkel,Kleinfeld (K'he),Kortüm,Kraus,Mauser,Metzner,Möhres,Mörike,Eu. Müller,Mundry,Oelkrug, Opitz,Penner(K'he),Pfaff,Poralla,Riecker,Rössler,Rüdorff,Schenk,Schwartz, Schweitzer,Schramm,Seelig,Seyffert,Stumpp,Varjú,Voelter,Wagenschein,Wegmann, Weitzel,Weser,Zähner.